

И.И.Гольдман, В.Д.Кривченков

СБОРНИК ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

М.: ГИТТЛ, 1957

Содержание

| | |
|--|-----|
| Предисловие | 4 |
| 1. Одномерное движение. Спектр энергии и волновые функции | 5 |
| 2. Прохождение через барьер | 9 |
| 3. Перестановочные соотношения. Соотношение неопределенности. Расплывание пакетов | 14 |
| 4. Момент количества движения. Спин | 18 |
| 5. Центральное-симметричное поле | 26 |
| 6. Движение частицы в магнитном поле | 28 |
| 7. Атом | 32 |
| 8. Молекула | 40 |
| 9. Рассеяние | 45 |
| Приложение I | 268 |
| Приложение II | 272 |

ПРЕДИСЛОВИЕ

Сборник состоит из задач по нерелятивистской квантовой механике, которые решались на семинарах, или предлагались в качестве так называемых «заданий» студентам IV курса физического факультета МГУ. В сборник помещены задачи различной трудности. Задачи, требующие проведения сравнительно больших вычислений, предназначались главным образом для студентов, специализирующихся по теоретической физике, основным учебным пособием которых при изучении квантовой механики являлась книга Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица «Квантовая механика».

Опыт преподавания показывает, что наибольшую трудность при изучении представляет матричная сторона квантовой механики, поэтому при написании данного сборника большое внимание уделялось задачам на составление матрицы возмущения и ее диагонализацию. В сборнике сравнительно много места уделено вспомогательным задачам на момент количества движения и спин, поскольку без уяснения этих фундаментальных понятий нельзя говорить о серьезном изучении квантовой механики.

Авторы считают своим долгом выразить благодарность аспиранту В. В. Толмачеву, студентам А. Р. Френкину и В. Д. Кукину за помощь при составлении сборника, а также редактору Е. Е. Жаботинскому за критические замечания.

И. Гольдман, В. Кривченков

ЗАДАЧИ

§ 1. ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ. СПЕКТР ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

1. Определить уровни энергии и нормированные волновые функции частицы, находящейся в «потенциальном ящике». Потенциальная энергия частицы $V = \infty$ при $x < 0$ и при $x > a$,
 $V = 0$ при $0 < x < a$.

2. Показать, что для частицы, находящейся в «потенциальном ящике» (см. предыдущую задачу), имеют место соотношения:

$$\bar{x} = \frac{1}{2} a, \quad \overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right).$$

Доказать, что для больших значений n последний результат совпадает с соответствующим классическим.

3. Определить распределение вероятностей различных значений импульса для частицы в «потенциальном ящике», находящейся в n -м энергетическом состоянии.

4. Определить уровни энергии и волновые функции частицы, находящейся в несимметрической потенциальной яме (см. рис. 1). Рассмотреть случай $V_1 = V_2$.

5. Гамильтониан осциллятора равен $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 \hat{x}^2}{2}$, где \hat{p} и \hat{x} удовлетворяют перестановочному соотношению $\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar$. Для того чтобы избавиться в последующих вычислениях

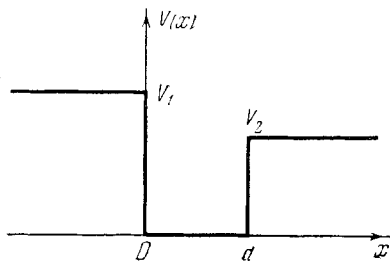


Рис. 1.

от \hbar , μ , ω , введем новые переменные \hat{P} и \hat{Q}

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{\mu\hbar\omega}} \hat{p}, \quad \hat{Q} = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad (\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = -i),$$

а энергию E будем выражать в единицах $\hbar\omega$ ($E = \epsilon\hbar\omega$). Уравнение Шредингера для осциллятора в новых переменных будет иметь вид

$$\hat{H}'\psi = \frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)\psi = \epsilon\psi.$$

а) Используя перестановочное соотношение $\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = -i$, показать, что

$$\frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)(\hat{Q} \pm i\hat{P})^n \psi = (\epsilon \mp n)(\hat{Q} \pm i\hat{P})^n \psi.$$

б) Определить нормированные волновые функции и уровни энергии осциллятора.

в) Определить соотношения коммутации для оператора $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P})$ и эрмитовски сопряженного ему оператора $\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P})$. Выразить волновую функцию n -го возбужденного состояния через волновую функцию основного состояния с помощью оператора \hat{a} .

г) Определить матричные элементы операторов \hat{P} и \hat{Q} в энергетическом представлении.

Указание. $\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 - 1 = (\hat{P} + i\hat{Q})(\hat{P} - i\hat{Q})$.

6. На основании результатов предыдущей задачи показать непосредственным перемножением матриц, что для осциллятора, находящегося в n энергетическом состоянии,

$$\overline{(\Delta x)^2} = \overline{x^2} = \frac{\hbar}{\mu\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad \overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} = \mu\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

7. Частица движется в потенциальном поле $V(x) = \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}$. Определить вероятность нахождения частицы вне классических границ для основного состояния.

8. Найти энергетические уровни частицы, движущейся в потенциальном поле следующего вида:

$$V(x) = \infty \quad (x < 0); \quad V(x) = \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} \quad (x > 0).$$

9. Написать уравнение Шредингера для осциллятора в « p » представлении и определить распределение вероятностей различных значений импульса.

10. Найти волновые функции и уровни энергии частицы в поле вида $V(x) = V_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a} \right)^2$ ($x > 0$) (см. рис. 2) и по-

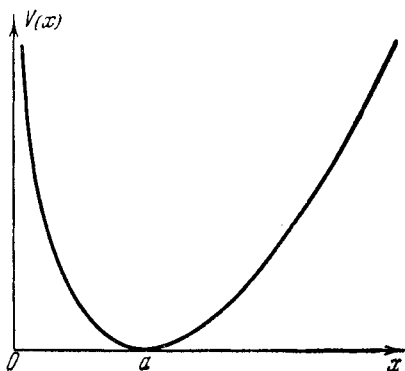


Рис. 2.

казать, что энергетический спектр совпадает со спектром осциллятора.

11. Определить уровни энергии для частицы, находящейся в потенциальном поле $V = -\frac{V_0}{\text{ch}^2 \frac{x}{a}}$ (см. рис. 3).

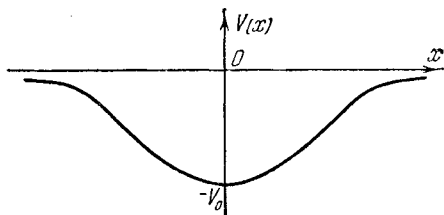


Рис. 3.

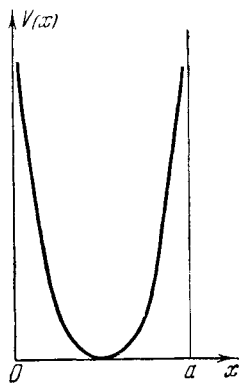


Рис. 4.

12. Определить энергетические уровни и волновые функции частицы в поле $V = V_0 \text{ctg}^2 \frac{\pi}{a} x$ ($0 < x < a$) (рис. 4), произвести нормировку волновой функции основного состояния.

Рассмотреть предельные случаи малых и больших значений V_0 .

13. Определить волновые функции заряженной частицы в однородном поле $V(x) = -Fx$.

14. Написать уравнение Шредингера в « p » представлении для частицы, движущейся в периодическом потенциальном поле $V(x) = V_0 \cos bx$.

15. Написать уравнение Шредингера в « p » представлении для частицы, движущейся в периодическом потенциальном поле $V(x) = V(x + b)$.

16. Определить зоны разрешенной энергии для частицы, движущейся в периодическом потенциальном поле, изобра-

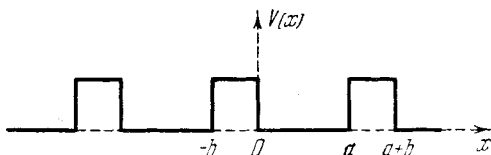


Рис. 5.

женном на рис. 5. Исследовать предельный случай $V_0 \rightarrow \infty$, $b \rightarrow 0$ при условии, что

$$V_0 b = \text{const.}$$

17. Для потенциала $V = -\frac{V_0}{\text{ch}^2 \frac{x}{a}}$ определить в квази-

классическом приближении уровни энергии и полное число дискретных уровней.

18. Определить в квазиклассическом приближении спектр энергии частицы в поле:

а) $V = \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}$ (осциллятор);

б) $V = V_0 \text{ctg}^2 \frac{\pi}{a} x$ ($0 < x < a$).

19. Определить в квазиклассическом приближении среднее значение кинетической энергии стационарного состояния.

20. Используя результат предыдущей задачи, найти в квазиклассическом приближении среднюю кинетическую энергию частицы в поле:

а) $V = \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}$;

б) $V = V_0 \operatorname{ctg}^2 \frac{\pi x}{a}$ ($0 < x < a$) (см. задачу 18).

21. Определить вид энергетического спектра частицы в поле $V(x) = ax^2$, используя квазиклассическое приближение и применяя теорему вириала.

22. Определить вид потенциальной энергии $V(x)$ по энергетическому спектру E_n в квазиклассическом приближении. $V(x)$ считать четной функцией $V(x) = V(-x)$, монотонно возрастающей при $x > 0$.

§ 2. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧЕРЕЗ БАРЬЕР

1. При изучении эмиссии электронов металлами необходимо принять во внимание то обстоятельство, что электроны с энергией, достаточной для выхода из металла, согласно квантовой механике, могут отражаться от границы металла. Рассматривая одномерную модель с потенциалом $V = -V_0$

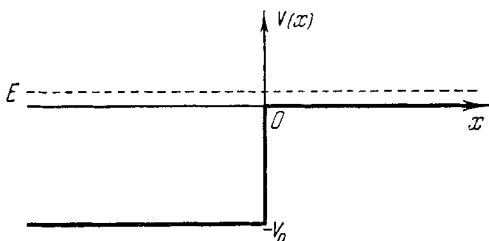


Рис. 6.

при $x < 0$ (внутри металла) и $V = 0$ при $x > 0$ (вне металла) (рис. 6), определить коэффициент отражения электрона с энергией $E > 0$ от поверхности металла.

2. В предыдущей задаче предполагалось, что потенциал на границе металла изменяется скачкообразно. В действительности это изменение потенциала происходит непрерывно в области, размеры которой порядка межатомных расстояний в металле. Аппроксимируя потенциал вблизи поверхности металла, с помощью функции

$$V = -\frac{V_0}{e^{\frac{x}{a}} + 1} \quad (\text{см. рис. 7})$$

определить коэффициент отражения электрона с энергией $E > 0$.

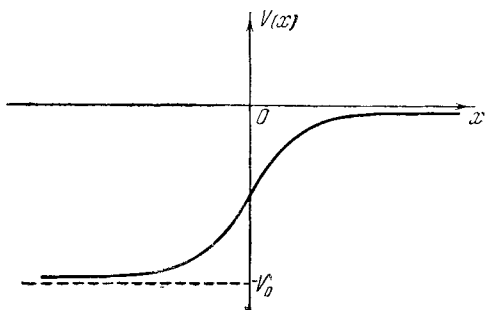


Рис. 7.

3. Определить коэффициент прохождения частицы через прямоугольный барьер (см. рис. 8).

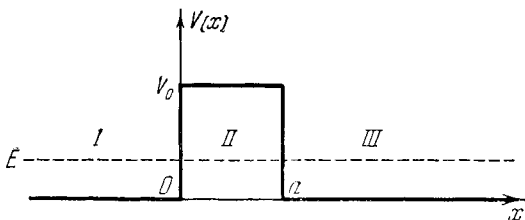


Рис. 8.

4. Определить коэффициент отражения частицы от прямоугольного барьера в случае $E > V_0$ (надбарьерное отражение).

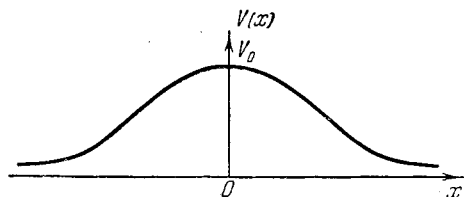


Рис. 9.

5. Вычислить коэффициент прохождения через потенциальный барьер $V(x) = \frac{V_0}{\text{ch}^2 \frac{x}{a}}$ (рис. 9) пото-

ка частиц, движущихся с энергией $E < V_0$.

6. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения электронов через поверхность металла

под действием сильного электрического поля напряженности F (рис. 10). Найти границы применимости расчета.

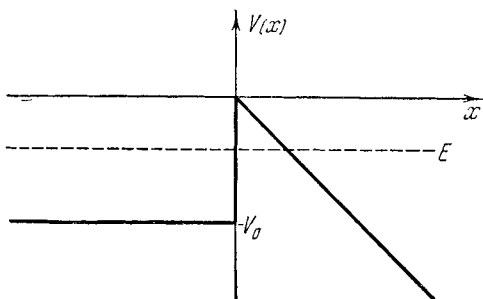


Рис. 10.

7. Изменение потенциала вблизи поверхности металла происходит в действительности непрерывно. Так, например, потенциал электрического изображения $V_{в.к.} = -\frac{e}{4x}$ действует на больших расстояниях от поверхности. Определить

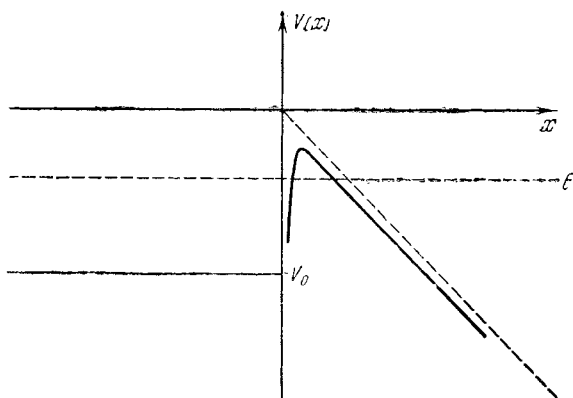


Рис. 11.

коэффициент прохождения D электронов через поверхность металла в электрическом поле с учетом силы электрического изображения (рис. 11).

8. Определить приближенно уровни энергии и волновые функции частицы в симметричном потенциальном поле

(см. рис. 12), если $E \ll V_0$ и проницаемость барьера мала ($\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} b^2 \gg 1$).

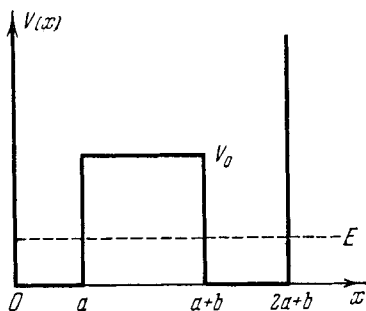


Рис. 12.

9. Симметричное поле $V(x)$ представляет собой две потенциальные ямы, разделенные барьером (см. рис. 13). Считая выполненным условие квазиклассичности, определить уровни

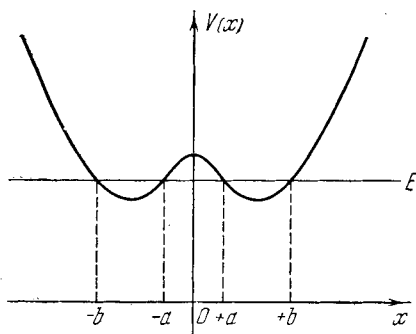


Рис. 13.

энергии частицы в поле $V(x)$. Сравнить полученный энергетический спектр с энергетическим спектром отдельной ямы. Найти расщепление энергетических уровней отдельной ямы.

Указание. См. приложение I.

10. Предположим, что до момента времени $t = 0$ между двумя симметричными потенциальными ямами (см. предыду-

шую задачу) существовала непроницаемая перегородка и частица находилась в левой яме в стационарном состоянии.

Определить, по прошествии какого времени τ после удаления перегородки частица окажется в правой яме.

11. Поле $V(x)$ представляет собой N одинаковых потенциальных ям, разделенных одинаковыми потенциальными

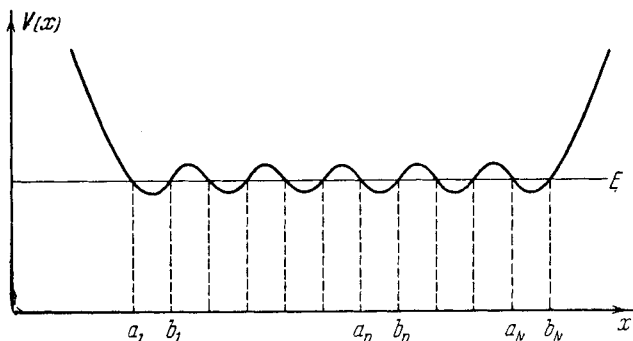


Рис. 14.

барьерами (см. рис. 14). Считая выполненным условие квазиклассичности, определить уровни энергии в поле $V(x)$.

Сравнить полученный энергетический спектр с энергетическим спектром отдельной ямы.

12. Считая выполненными условия квазиклассичности, найти квазистационарные уровни частицы в симметричном поле, изображенном на рис. 15.

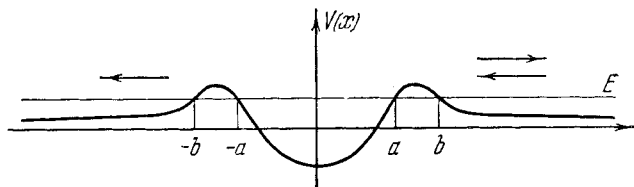


Рис. 15.

Найти также коэффициент прохождения $D(E)$ для частиц с энергией $E < V_0$.

§ 3. ПЕРЕСТАНОВОЧНЫЕ СООТНОШЕНИЯ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ. РАСПЛЫВАНИЕ ПАКЕТОВ

1. Показать, что если два оператора \hat{A} и \hat{B} удовлетворяют перестановочному соотношению $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}$, причем \hat{A} и \hat{B} — эрмитовы, то имеет место следующее соотношение:

$$\sqrt{(\Delta\hat{A})^2 (\Delta\hat{B})^2} \geq \frac{|\hat{C}|}{2}.$$

2. Найти соотношение неопределенности для операторов \hat{q} и $F(\hat{p})$, если \hat{q} и \hat{p} удовлетворяют перестановочному соотношению $\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = i\hbar$.

Указание. Считать функцию $F(\hat{p})$ заданной в виде ряда Тейлора.

3. Оценить энергию основного состояния осциллятора, используя соотношение неопределенности.

4. Оценить энергию электрона на K оболочке атома с порядковым номером Z в нерелятивистском и релятивистском случае.

5. Оценить энергию основного состояния двухэлектронного атома, заряд ядра которого равен Z , с помощью соотношения неопределенностей.

6. Магнитное поле, создаваемое свободным электроном, обусловлено как его движением, так и наличием у него собственного магнитного момента.

Как известно из электродинамики, напряженность магнитного поля движущегося заряда по порядку величины равна

$$H_1 \sim \frac{ev}{cr^2},$$

а напряженность поля магнитного диполя с моментом μ

$$H_2 \sim \frac{\mu}{r^3}.$$

Для того чтобы можно было определить магнитный момент μ свободного электрона на основании измерения напряженности создаваемого им поля, необходимо выполнение следующих двух условий:

$$H_2 \gg H_1 \quad (1)$$

и

$$\Delta r \ll r. \quad (2)$$

Последнее условие означает, что область локализации электрона Δr должна быть много меньше расстояния от этой области до точки наблюдения магнитного поля.

Могут ли быть одновременно выполнены эти два условия?

Указание. Принять во внимание соотношение неопределенностей и значение магнитного момента электрона $\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$.

7. Какой физический смысл имеет величина p_0 в выражении волновой функции

$$\psi(x) = \varphi(x) e^{\frac{ip_0x}{\hbar}},$$

если функция $\varphi(x)$ действительна.

8. Показать, что среднее значение импульса в стационарном состоянии дискретного спектра $\overline{p} = 0$.

9. Волновая функция свободной частицы в момент времени $t = 0$ задана следующим образом $\psi(x, 0) = \varphi(x) e^{\frac{ip_0x}{\hbar}}$. Функция $\varphi(x, 0)$ действительна и заметно отличается от нуля лишь для значений x , лежащих в области $-\delta < x < +\delta$. Определить, в какой области значений x будет отлична от нуля волновая функция в момент времени t .

10. Найти изменение волновой функции, заданной в момент времени $t = 0$ (расплывание волнового пакета):

а) свободное движение

$$\psi(r, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp\left\{\frac{ip_0r}{\hbar} - \frac{r^2}{2\delta^2}\right\};$$

б) движение в однородном поле

$$\psi(r, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp\left\{\frac{ip_0r}{\hbar} - \frac{r^2}{2\delta^2}\right\};$$

в) движение частицы в потенциальном поле $V = \frac{\mu\omega^2x^2}{2}$

$$\psi(x, 0) = c \exp\left\{\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\right\}, \quad \alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}.$$

11. Доказать справедливость соотношения

$$e^{\hat{L}\hat{a}e^{-\hat{L}}} = \hat{a} + [\hat{L}\hat{a}] + \frac{1}{2!}[\hat{L}[\hat{L}\hat{a}]] + \frac{1}{3!}[\hat{L}[\hat{L}[\hat{L}\hat{a}]]] + \dots$$

12. Осциллятор при $t = -\infty$ находился в основном состоянии. Определить вероятность того, что при $t = +\infty$

осциллятор будет находиться в n -м возбужденном состоянии, если на него действовала сила $f(t)$, где $f(t)$ — произвольная функция времени ($f = 0$ при $t \rightarrow \pm \infty$).

Провести расчет до конца для

$$а) f(t) = f_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}},$$

$$б) f(t) = f_0 \frac{1}{\left(\frac{t}{\tau}\right)^2 + 1}.$$

13. Показать, что задача определения движения осциллятора под действием вынуждающей силы $f(t)$ может быть сведена к более простой задаче определения движения свободного осциллятора, если ввести новую переменную $x_1 = x - \xi(t)$, где $\xi(t)$ удовлетворяет классическому уравнению $\mu \ddot{\xi} = f(t) - \mu \omega^2 \xi$.

14. Найти функцию Грина для осциллятора, собственная частота которого меняется во времени, выразив ее через решение классического уравнения для осциллятора с переменной частотой.

15. Используя функцию Грина, полученную в предыдущей задаче, определить изменение во времени плотности вероятности для частицы, движущейся в потенциальном поле $V(x) = \frac{\mu \omega^2 x^2}{2}$ ($\omega = \text{const}$). Волновая функция частицы в момент времени $t = 0$ равна

$$\psi(x, 0) = c e^{-\frac{\alpha^2 (x - x_0)^2}{2} + \frac{i p_0 x}{\hbar}}.$$

16. Найти функцию Грина для осциллятора, собственная частота которого меняется во времени и подверженного действию возмущающей силы $f(t)$.

Указание. Использовать результаты задач 13 и 14 § 3.

17. При $t = 0$ осциллятор находился в n -м энергетическом состоянии. Определить вероятность перехода осциллятора в m -е состояние под действием возмущающей силы $f(t)$. Найти среднее значение и дисперсию энергии в момент времени t .

18. Поскольку уравнение Шредингера является уравнением первого порядка по времени, $\psi(t)$ однозначно определяется заданием $\psi(0)$. Запишем эту связь в виде

$$\psi(t) = \hat{S}(t) \psi(0),$$

где $\hat{S}(t)$ — некоторый оператор.

а) Показать, что оператор $\hat{S}(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar\dot{\hat{S}}(t) = \hat{H}\hat{S}(t)$$

и является унитарным оператором, т. е. $\hat{S}^+ = \hat{S}^{-1}$.

б) Показать, что в случае, когда \hat{H} не зависит от времени, $\hat{S}(t)$ имеет вид

$$\hat{S}(t) = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}.$$

19. Среднее значение некоторого оператора \hat{L} в момент времени t определяется следующим выражением:

$$\bar{\hat{L}}(t) = \int \psi^*(t) \hat{L} \psi(t) d\tau.$$

а) Показать, что зависящий от времени оператор $\hat{\mathcal{L}} = \hat{S}^{-1}(t) \hat{L} \hat{S}(t)$, где $\hat{S}(t)$ определяется соотношением $\hat{S}(t) \psi(0) = \psi(t)$, удовлетворяет условию $\int \psi^*(0) \hat{\mathcal{L}} \psi(0) \times \times d\tau = \bar{\hat{L}}(t)$.

б) Проверить справедливость операторного уравнения

$$i\hbar\dot{\hat{\mathcal{L}}} = \hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{L}},$$

где

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{S}^{-1} \hat{H} \hat{S}.$$

в) Показать, что если операторы L и M удовлетворяют правилу коммутации

$$\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} = i\hat{N},$$

то для зависящих от времени операторов

$$\hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{M}} - \hat{\mathcal{M}}\hat{\mathcal{L}} = i\hat{\mathcal{N}}.$$

20. Определить зависящий от времени оператор координаты \hat{x} (в координатном представлении) для:

а) свободного движения частицы,

б) осциллятора.

21. Воспользовавшись результатами предыдущей задачи, определить зависимость от времени дисперсии координаты в случае свободного движения.

22. Волновая функция частицы в момент $t = 0$ имеет вид $\psi(x) = \varphi(x) e^{i \frac{p_0 x}{\hbar}}$, где $\varphi(x)$ — действительная нормированная к единице функция. Определить значение дисперсии $\overline{(\Delta x)^2}$ в любой момент времени в случае а и б задачи 20 § 3. Показать, что в случае осциллятора $\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2}$, т. е. расплывания нет, если $\varphi(x) = c e^{-\frac{p_0 x^2}{\hbar}}$ (см. задачу 10 в) § 3).

§ 4. МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ. СПИН

1. Получить выражения для операторов $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ в сферических координатах, исходя из того, что $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ являются операторами бесконечно малого поворота.

2. Доказать следующие коммутационные соотношения:

$$а) [\hat{l}_i, \hat{x}_k] = i e_{ikl} \hat{x}_l,$$

$$б) [\hat{l}_i, \hat{p}_k] = i e_{ikl} \hat{p}_l,$$

где e_{ikl} есть антисимметрический единичный тензор третьего ранга, компоненты которого меняют знак при перестановке двух любых его индексов, т. е. $e_{ikl} = -e_{ilk}$, причем $e_{123} = 1$ (1, 2, 3 соответствует x, y, z).

3. Доказать справедливость соотношений:

$$а) [\hat{l}, (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)] = 0,$$

$$б) [\hat{l}, (x^2 + y^2 + z^2)] = 0.$$

4. Показать, что в состоянии ψ с определенным значением \hat{l}_z ($\hat{l}_z \psi = m \psi$) среднее значение \hat{l}_x и \hat{l}_y равно нулю.

Указание. Найти среднее значение в состоянии ψ левой и правой частей соотношений коммутаций

$$\hat{l}_y \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_y = i \hat{l}_x,$$

$$\hat{l}_z \hat{l}_x - \hat{l}_x \hat{l}_z = i \hat{l}_y.$$

5. Получить выражения для оператора момента относительно некоторой оси (z') через операторы $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$.

6. Показать, что если в некотором состоянии ψ $\hat{l}_z \psi = m \psi$, то среднее значение момента относительно оси z' , составляющей с осью z угол θ , равно $m \cos \theta$.

Этот результат можно истолковать наглядно следующим образом. Вектор момента в состоянии ψ_m равномерно «размазан» на конусе, осью которого является ось z , причем длина образующей равна $\sqrt{l(l+1)}$, а высота m . Среднее значение проекции на плоскость xu равно нулю, а проекция на ось z' после усреднения оказывается равной $m \cos \theta$.

7. Найти закон преобразования шаровых функций Y_{11} , Y_{10} , $Y_{1,-1}$ при повороте системы координат, характеризуемом углами Эйлера θ , ψ , φ .

Указание. Представить шаровые функции в виде

$$Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x + iy}{r}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}, \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{x - iy}{r}.$$

8. В приборе типа установки Штерна—Герлаха пучок атомов, обладающих полным моментом J , отклоняется различным образом в зависимости от значения проекции момента на направление магнитного поля прибора. Если пучок частиц имеет определенное значение момента относительно оси, не совпадающей с направлением магнитного поля прибора, то он расщепится на $2J + 1$ пучок.

Определить относительную интенсивность этих пучков, если $J=1$, а проекция момента относительно некоторой оси, составляющей угол θ с направлением магнитного поля прибора, имеет определенное значение $M(+1, 0, -1)$.

9. Проекция спина электрона на ось z с достоверностью имеет значение $+1/2$. Какова вероятность того, что проекция спина на направление z' , составляющее угол θ с осью z , будет иметь значение $+1/2$ и $-1/2$? Определить среднее значение проекции спина на указанное направление.

10. Наиболее общий вид спиновой функции частицы со спином $1/2$ в « z »-представлении есть

$$\begin{aligned} \psi_1 &= e^{i\alpha} \cos \delta, \\ \psi_2 &= e^{i\beta} \sin \delta. \end{aligned}$$

Эта функция описывает такое состояние частицы, в котором вероятность значения проекции спина $+1/2$ на ось z (или $-1/2$) равна $\cos^2 \delta$ (или $\sin^2 \delta$).

Каков будет результат измерения проекции спина на совершенно произвольное направление?

11. Спиновая функция в « z »-представлении имеет вид

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \cos \delta \\ e^{i\beta} \sin \delta \end{pmatrix}.$$

Существует ли такое направление в пространстве, вдоль которого проекция спина с достоверностью имеет значение $+1/2$?

Если существует, то найти сферические координаты (θ, Φ) этого направления.

Указание. θ и Φ найти из условия обращения в нуль второй компоненты спиновой функции.

12. Имеется совокупность невзаимодействующих частиц одного и того же сорта. Импульс частиц одинаков; спин равен $1/2$. Если бы эти частицы не обладали спином, то мы бы имели право такую совокупность называть чистым ансамблем. Но нам неизвестно, одинаково ли направление спинов у всех частиц.

Можно ли посредством эксперимента типа опыта Штерна—Герлаха сказать, является ли этот пучок частиц чистым ансамблем или смешанным?

13. Показать, что оператор, преобразующий компоненты спиновой функции при повороте на углы Эйлера θ, ψ, φ , имеет вид $\hat{T}(\psi, \theta, \varphi) = e^{i\varphi \hat{s}_z} e^{i\theta \hat{s}_x} e^{i\psi \hat{s}_z}$.

14. Показать, что при повороте системы координат на угол Φ относительно оси, направляющие косинусы которой равны α, β, γ , матрица преобразования компонент спиновой функции может быть представлена следующим образом:

$$\hat{T} = e^{i\Phi(\alpha \hat{s}_x + \beta \hat{s}_y + \gamma \hat{s}_z)} = \cos \frac{\Phi}{2} + 2i(\alpha \hat{s}_x + \beta \hat{s}_y + \gamma \hat{s}_z) \sin \frac{\Phi}{2}.$$

Указание. Углы Эйлера θ, ψ, φ связаны с α, β, γ и Φ следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} \cos \frac{\Phi}{2} &= \cos \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{1}{2}(\varphi + \psi), \\ \alpha \sin \frac{\Phi}{2} &= \sin \frac{\theta}{2} \cdot \cos \frac{1}{2}(\varphi - \psi), \\ \beta \sin \frac{\Phi}{2} &= \sin \frac{\theta}{2} \cdot \sin \frac{1}{2}(\varphi - \psi), \\ \gamma \sin \frac{\Phi}{2} &= \cos \frac{\theta}{2} \cdot \sin \frac{1}{2}(\varphi + \psi). \end{aligned}$$

Отметим, что $e^{i\Phi(\alpha \hat{s}_x + \beta \hat{s}_y + \gamma \hat{s}_z)}$ не равно $e^{i\Phi \alpha \hat{s}_x} \cdot e^{i\Phi \beta \hat{s}_y} \cdot e^{i\Phi \gamma \hat{s}_z}$.

15. Найти собственные функции оператора $\alpha\hat{s}_x + \beta\hat{s}_y + \gamma\hat{s}_z$, где $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$, и показать, что коэффициенты разложения какой-либо спиновой функции $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ по этим функциям определяют вероятность того, что значение проекции спина на направление, характеризуемое направляющими косинусами α , β , γ , равно $+1/2$ или $-1/2$.

16. Найти матрицу преобразования компонент спиновой функции частицы со спином 1 при произвольном повороте системы координат.

17. Момент частицы равен j , проекция момента на ось z имеет максимальное значение.

Определить вероятности различных значений проекции момента на направление, составляющее угол θ с осью z .

18. Система, обладающая полным моментом J , находится в состоянии $J_z = M$. Определить вероятность того, что при измерении (например, в опыте Штерна—Герлаха) проекции момента на направление z' , составляющее с осью z угол θ , получится значение M' .

19. Показать, что если $\psi_m^{(0)}$ есть собственная функция оператора \hat{J}_z , соответствующая собственному значению m , то функция $\psi_m = e^{-i\hat{J}_z\varphi} e^{-i\hat{J}_y\theta} \psi_m^{(0)}$ является собственной функцией оператора $\hat{J}_z' = \hat{J}_x \sin\theta \cos\varphi + \hat{J}_y \sin\theta \sin\varphi + \hat{J}_z \cos\theta$, принадлежащей тому же собственному значению, т. е.

$$\hat{J}_z' \psi_m = m \psi_m.$$

Указание. Использовать соотношения (см. задачу 11 § 3)

$$e^{-i\hat{J}_y\theta} \hat{J}_z e^{i\hat{J}_y\theta} = \hat{J}_z \cos\theta + \hat{J}_x \sin\theta,$$

$$e^{-i\hat{J}_z\varphi} \hat{J}_x e^{i\hat{J}_z\varphi} = \hat{J}_x \cos\varphi + \hat{J}_y \sin\varphi.$$

20. Частица со спином $1/2$ движется в поле центральных сил. Найти волновые функции этой частицы, являющиеся одновременно собственными функциями трех коммутирующих операторов

$$\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z, \quad \hat{l}^2, \quad \hat{j}^2.$$

21. Состояние электрона характеризуется квантовыми числами l , j , m . Воспользовавшись волновыми функциями,

полученными в предыдущей задаче, определить возможные значения проекций орбитального и спинового моментов и соответствующие этим значениям вероятности. Найти также средние значения проекций.

22. Условимся под направлением спина понимать то направление, вдоль которого проекция спина с достоверностью имеет значение $\pm 1/2$. Будем это направление характеризовать полярными углами Θ , Φ . Пусть состояние частицы описывается волновой функцией $\psi(l, j = l \pm 1/2, m)$ (см. задачу 20 § 4). Очевидно, что направление спина такой частицы в различных точках пространства будет, вообще говоря, неодинаково. Установить зависимость между углами Θ , Φ и пространственными координатами частицы.

23. Найти волновые функции системы из двух частиц со спином $1/2$, которые являются собственными функциями коммутирующих операторов квадрата и проекции на ось z суммарного спина.

24. Система состоит из двух частиц, причем момент первой частицы $l_1 = 1$, а второй $l_2 = l$. Полный момент J в этом случае может принимать значения $l + 1$, l и $l - 1$. Выразить собственные функции операторов \hat{J}^2 и \hat{J}_z через собственные функции квадратов момента и проекций момента на ось z отдельных частиц.

25. Обозначим через $\hat{\sigma}_1$, $\hat{\sigma}_2$ спиновые операторы двух частиц, а через \mathbf{r} — радиус-вектор, соединяющий эти частицы. Показать, что любая целая положительная степень каждого из операторов

$$(\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2) \text{ и } \hat{S}_{12} = \frac{3(\hat{\sigma}_1 \mathbf{r})(\hat{\sigma}_2 \mathbf{r})}{r^2} - (\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2),$$

также как и произведения этих степеней, могут быть представлены в виде линейной комбинации этих же операторов и единичной матрицы.

26. Показать, что оператор \hat{S}_{12} (см. предыдущую задачу) выражается через оператор суммарного спина $\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)$ следующим образом:

$$\hat{S}_{12} = \frac{6(\hat{S}\mathbf{r})^2}{r^2} - 2\hat{S}^2$$

и что в случае, когда суммарный спин двух частиц равен единице, \hat{S}_{12} можно представить в виде трехрядной матрицы

$$\hat{S}_{12} = \frac{4\sqrt{\pi}}{V^5} \begin{pmatrix} Y_{20} & -\sqrt{3}Y_{2,-1} & \sqrt{6}Y_{2,-2} \\ -\sqrt{3}Y_{21} & -2Y_{20} & \sqrt{3}Y_{2,-1} \\ \sqrt{6}Y_{22} & \sqrt{3}Y_{21} & Y_{20} \end{pmatrix}.$$

27. Показать, что нормированная часть волновой функции состояния 3D_1 , содержащая спиновые и угловые переменные, может быть записана следующим образом:

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \hat{S}_{12} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (J=1, \quad M=1, \quad L=2, \quad S=1),$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \hat{S}_{12} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (J=1, \quad M=0, \quad L=2, \quad S=1),$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \hat{S}_{12} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (J=1, \quad M=-1, \quad L=2, \quad S=1).$$

Указание. См. задачу 24 § 4.

28. Доказать справедливость следующих равенств:

а) $\{\hat{J}^2, \hat{A}\} = i([\hat{A}\hat{J}] - [\hat{J}\hat{A}]),$

б) $\{\hat{J}^2, \{\hat{J}^2, \hat{A}\}\} = 2(\hat{J}^2\hat{A} + \hat{A}\hat{J}^2) - 4\hat{J}(\hat{J}\hat{A}),$

в) $(\hat{A})_{nJM}^{n'JM'} = \frac{(\hat{J}\hat{A})_{nJ}^{n'J}}{J(J+1)} (\hat{J})_{JM}^{JM'}.$

Здесь \hat{A} есть некоторая векторная физическая величина, удовлетворяющая правилу коммутации

$$\{\hat{J}_i, \hat{A}_k\} = ie_{ikl}\hat{A}_l.$$

29. Найти среднее значение оператора $\hat{\mu} = g_1\hat{J}_1 + g_2\hat{J}_2$ в состоянии, характеризуемом квантовыми числами J, M_J, J_1, J_2 , если полный момент \hat{J} равен $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$.

Указание. Воспользоваться формулой, приведенной в предыдущей задаче.

30. Найти магнитный момент (в ядерных магнетонах) ядра N^{15} , в котором до заполненной оболочки не хватает одного протона в состоянии $p_{1/2}$. Магнитный момент свободного протона равен $\mu_p = 2,79$.

31. Вычислить магнитный момент ядра O^{17} , содержащего сверх заполненной оболочки один нейтрон в состоянии $d_{5/2}$. Магнитный момент свободного нейтрона равен $\mu_n = -1,91$.

32. Каково было бы численное значение магнитного момента дейтрона, если бы дейтрон находился в состоянии:

а) 3S_1 , б) 1P_1 , в) 3P_1 , г) 3D_1 .

33. Предполагая, что основное состояние дейтрона есть суперпозиция 3S_1 и 3D_1 состояний определить вес D волны, если $\mu_p = 2,78$, $\mu_n = -1,91$, $\mu_d = 0,85$.

34. Выразить квадрупольный момент дейтрона через среднее квадратичное расстояние, предполагая, что дейтрон находится в состоянии: а) 1P_1 , б) 3P_1 .

35. Используя выражение для матричных элементов векторов (см. Л. Ландау и Е. Лифшиц, Квантовая механика, 1948 г., стр. 116), показать, что квадрупольный момент ядра равен

$$Q = I(2I-1) \sum_{i=1}^Z \sum_{n'} \{ 2(I+1) |(z_i)_{n', I+1}^{n, I}|^2 - 2I |(z_i)_{n', I-1}^{n, I}|^2 \}.$$

Суммирование проводится по всем протонам, число которых равно Z . Здесь I — спин ядра, а n — совокупность всех остальных квантовых чисел, характеризующих состояние.

36. Обозначим через σ_i спиновую переменную i -го электрона. Эта переменная принимает два значения, $+1$ и -1 . Показать, что на функцию $f(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_l, \dots, \sigma_n)$ спиновых переменных n -электронов операторы

$$\hat{\sigma}_{lx} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_l; \quad \hat{\sigma}_{ly} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_l; \quad \hat{\sigma}_{lz} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_l,$$

относящиеся к электрону номера l , действуют следующим образом:

$$\hat{\sigma}_{lx} f = f(\sigma_1, \dots, \sigma_{l-1}, -\sigma_l, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_n),$$

$$\hat{\sigma}_{ly} f = -i\sigma_l f(\sigma_1, \dots, \sigma_{l-1}, -\sigma_l, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_n),$$

$$\hat{\sigma}_{lz} f = \sigma_l f(\sigma_1, \dots, \sigma_{l-1}, \sigma_l, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_n).$$

37. Воспользовавшись результатом предыдущей задачи, показать, что оператор квадрата полного спинового момента n -электронов может быть представлен в виде

$$\hat{S}^2 = n - \frac{n^2}{4} + \sum_{k < l} P_{kl},$$

где P_{kl} есть оператор перестановки спиновых переменных σ_k и σ_l , т. е.

$$\begin{aligned} P_{kl} f(\sigma_1, \dots, \sigma_{k-1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}, \dots, \sigma_{l-1}, \sigma_l, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_n) = \\ = f(\sigma_1, \dots, \sigma_{k-1}, \sigma_l, \sigma_{k+1}, \dots, \sigma_{l-1}, \sigma_k, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_n). \end{aligned}$$

38. Показать, что в системе из двух частиц, обладающих спином $1/2$, в случае гамильтониана, симметричного относительно спинов, величина суммарного спина S представляет собой интеграл движения.

39. Система состоит из двух частиц. Спин одной равен $1/2$, другой 0. Показать, что при любом законе взаимодействия этих частиц орбитальный момент количества движения является сохраняющейся величиной.

40. Имеется возбужденное ядро A со спином 1, находящееся в четном состоянии. Энергетически возможна реакция с испусканием α -частицы

$$A \rightarrow B + \alpha.$$

Устойчивое ядро B , получающееся при этой реакции, пусть имеет спин, равный нулю, и находится также в четном состоянии. На основании сохранения момента и четности показать, что такая реакция запрещена.

41. Показать, что L — орбитальный момент относительного движения двух α -частиц — всегда является четным числом ($L = 0, 2, 4, \dots$).

42. Может ли возбужденное ядро Be_4^8 со спином, равным единице, распасться на две α -частицы.

43. Исходя из того, что единственное связанное состояние системы нейтрон — протон (n, p) четно, суммарный спин в этом состоянии равен единице и силы взаимодействия (n, n) и (n, p) одинаковы, показать, что два нейтрона не могут образовать связанной системы,

§ 5. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ

1. Частица движется в центрально-симметричном поле. Уравнение для радиальной части волновой функции R_{nl} преобразовать к виду уравнения Шредингера для одномерного движения.

2. Найти радиальную волновую функцию частицы в центрально-симметричном поле в квазиклассическом приближении.

3. Доказать, что в центрально-симметричном поле в случае дискретного спектра минимальное значение энергии при заданном l (l — орбитальное квантовое число) растет с увеличением l .

4. Система состоит из двух частиц, массы которых μ_1 и μ_2 . Выразить оператор суммарного орбитального момента $\hat{l}_1 + \hat{l}_2$ и суммарного импульса $\hat{p}_1 + \hat{p}_2$ через координаты центра тяжести $R = \frac{\mu_1 r_1 + \mu_2 r_2}{\mu_1 + \mu_2}$ и взаимного расстояния $r = r_2 - r_1$. Показать, что если потенциальная энергия взаимодействия частиц зависит от их взаимного расстояния $U = U(|r_2 - r_1|)$, то гамильтониану можно придать вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(\mu_1 + \mu_2)} \Delta_R - \frac{\hbar^2(\mu_1 + \mu_2)}{2\mu_1\mu_2} \Delta_r + U(r),$$

где Δ_R и Δ_r — операторы Лапласа по компонентам векторов R и r .

5. Определить волновые функции и энергетические уровни трехмерного изотропного осциллятора.

6. Решить предыдущую задачу разделением переменных в декартовых координатах. Представить волновые функции для $n_r = 0$, $l = 1$ (см. предыдущую задачу) в виде линейной комбинации найденных волновых функций.

7. Считая, что нуклон в легком ядре движется в усредненном потенциальном поле вида $U(r) = -U_0 + \frac{\mu\omega^2}{2}r^2$, определить число частиц одного сорта (нейтронов или протонов) в заполненных оболочках. Под оболочкой следует понимать совокупность состояний с одним и тем же значением энергии.

8. Вычислить теоретические радиусы ядер He_2^4 и O_8^{16} , имеющих замкнутые оболочки, исходя из предположений

относительно потенциала, высказанных в предыдущей задаче. Под теоретическим радиусом ядра следует понимать расстояние от центра тяжести ядра до той точки, где «ядерная плотность» $\rho(r) = \sum_{\nu} \psi_{\nu}^*(r) \psi_{\nu}(r)$ (суммирование проводится по всем нуклонам) падает сильнее всего, т. е.

$$\left(\frac{d^2 \rho}{dr^2} \right)_{r=0} = 0.$$

9. Взаимодействие между протоном и нейтроном можно приближенно описать потенциалом $U(r) = -Ae^{-r/a}$. Найти волновую функцию основного состояния ($l=0$). Определить связь между глубиной ямы A и величиной a , характеризующей радиус действия сил, если эмпирическое значение энергии связи дейтрона $E = -2,2 \text{ Мэв}$.

10. Определить приближенно энергию основного состояния дейтрона, если потенциал $U(r) = -Ae^{-r/a}$ ($A = 32 \text{ Мэв}$, $a = 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ см}$), исходя из вариационного принципа Ритца. В качестве класса допустимых радиальных волновых функций взять функции вида $R = ce^{-\frac{\alpha r}{2a}}$, зависящие от параметра α . Величина c определяется через α из условия нормировки $\int_0^{\infty} R^2 r^2 dr = 1$.

11. Определить энергетические уровни и волновые функции частицы, находящейся в сферическом «потенциальном ящике».

$$U(r) = 0 \quad (r < a); \quad U(r) = \infty \quad (r > a).$$

Рассмотреть случай $l=0$.

12. Определить дискретный спектр энергии частицы с моментом $l=0$, находящейся в центрально-симметрической потенциальной яме

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

13. Применяя теорию возмущения, качественно определить изменение энергетических уровней при переходе от

потенциала $U(r) = \begin{cases} -U_0 & (r < a), \\ 0 & (r > a) \end{cases}$ к потенциалу, изображенному на рис. 16.

14. Потенциальная энергия α -частицы в поле ядра состоит из двух частей: кулоновского отталкивания и короткодействующего притяжения поля ядерных сил. Вид потенциальной

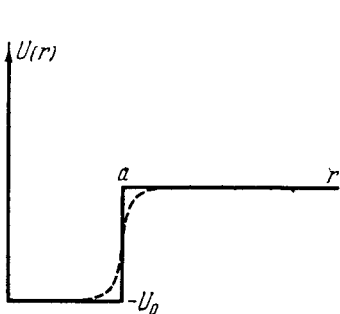


Рис. 16.

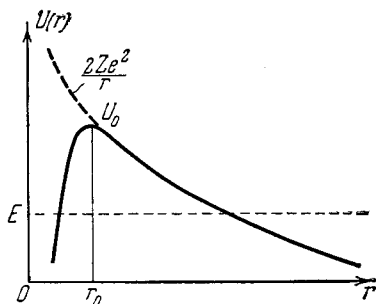


Рис. 17.

ной энергии схематически изображен на рис. 17. Испускание α -частиц представляет собой специфически квантовое явление, обусловленное прозрачностью барьера. Рассмотрим прохождение частицы (с моментом $l = 0$) через сферический потенциальный барьер упрощенной формы:

$$\begin{aligned} U(r) &= 0 & (r < r_1), \\ U(r) &= U_0 & (r_1 < r < r_2), \\ U(r) &= 0 & (r_2 < r). \end{aligned}$$

Найти соотношение между периодом распада и энергией.

§ 6. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1. Пусть волновая функция электрона в начальный момент времени имеет вид

$$\Psi(x, y, z, 0) = \psi(x, y, 0) \varphi(z, 0).$$

Тогда в однородном магнитном поле \mathcal{H} , направленном вдоль оси z , волновая функция в момент времени t будет также иметь вид произведения $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, t) \times$

$\times \varphi(z, t)$, поскольку в уравнении Шредингера переменная z допускает отделение. Показать, что функция $\psi(x, y, T)$ принимает с точностью до фазового множителя начальное значение, если T — период классического движения частицы в магнитном поле.

2. Показать, что в случае наличия магнитного поля для операторов компонент скорости имеют место следующие правила коммутации:

$$\hat{v}_x \hat{v}_y - \hat{v}_y \hat{v}_x = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \mathcal{H}_z;$$

$$\hat{v}_y \hat{v}_z - \hat{v}_z \hat{v}_y = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \mathcal{H}_x;$$

$$\hat{v}_z \hat{v}_x - \hat{v}_x \hat{v}_z = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \mathcal{H}_y.$$

3. Основываясь на результатах задач 2 § 6 и 5 § 1, определить энергию заряженной частицы, движущейся в постоянном магнитном поле.

4. Определить энергетический спектр заряженной частицы, движущейся в однородном электрическом и однородном магнитном полях, направления напряженностей которых взаимно перпендикулярны.

5. Определить волновые функции заряженной частицы при движении во взаимно перпендикулярных однородных магнитном и электрическом полях.

6. Заряженная частица находится в однородном магнитном поле и в центрально-симметричном поле вида $U(r) = \frac{\mu\omega_0^2 r^2}{2}$. Определить энергетический спектр частицы.

7. Определить зависящие от времени операторы координат \hat{x} , \hat{y} заряженной частицы, движущейся в однородном магнитном поле (векторный потенциал $A_x = -\frac{\mathcal{H}}{2} y$, $A_y = \frac{\mathcal{H}}{2} x$, $A_z = 0$). Найти $(\hat{x} - \hat{x})^2$ и $(\hat{y} - \hat{y})^2$ как функции времени.

8. Определить уровни энергии и волновые функции заряженной частицы, движущейся в однородном магнитном поле. Воспользоваться цилиндрической системой координат.

Векторный потенциал взять в форме $A_\varphi = \frac{\mathcal{H}}{2} \rho$, $A_\rho = A_z = 0$.

9. Найти компоненты плотности тока для заряженной частицы, движущейся в однородном магнитном поле для состояния, характеризуемого квантовыми числами n , m , k_z (см. предыдущую задачу).

10. Найти в квазиклассическом приближении уровни энергии заряженной частицы, находящейся в однородном магнитном поле (цилиндрические координаты).

11. Определить классически доступную область радиального движения частицы в магнитном поле (см. предыдущую задачу).

12. Оценить минимальную «размазанность» орбиты в радиальном направлении для заряженной частицы в магнитном поле.

13. Выразить, согласно классической механике, координаты центра окружности, по которой движется заряженная частица в однородном магнитном поле через координаты x , y и обобщенные импульсы p_x , p_y . Рассматривая в этих выражениях координаты и импульсы как операторы, найти перестановочные соотношения для введенных таким образом координат «центра орбиты» и соответствующие соотношения неопределенностей. Показать, что сумма квадратов координат «центра орбиты» принимает дискретные значения $\frac{2\hbar c}{|e|\mathcal{H}}(n + 1/2)$, где $n = 0, 1, 2, \dots$

14. Показать, что в однородном магнитном поле, переменном во времени, волновая функция частицы со спином распадается на произведение координатной и спиновой функций.

15. Частица со спином $1/2$ находится в однородном магнитном поле, направленном по оси z , изменяющемся по абсолютной величине по произвольному закону $\mathcal{H} = \mathcal{H}(t)$. В начальный момент времени ($t = 0$) спиновая функция имела вид $\begin{pmatrix} e^{-i\alpha \cos \delta} \\ e^{i\alpha \sin \delta} \end{pmatrix}$. Определить среднее значение проекции спина на оси x и y , а также на направление, вдоль которого проекция спина имеет определенное значение в момент времени t .

16. В области $x > 0$ имеется однородное магнитное поле $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$, $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}$; в области $x < 0$ поля нет. На плоскость раздела падает из области $x < 0$ пучок поляризованных нейтронов с импульсом p . Найти коэффициент отражения нейтронов от границы раздела.

17. Частица со спином $1/2$ находится в однородном магнитном поле, постоянном по абсолютной величине и изменяющемся во времени по закону

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_x &= \mathcal{H} \sin \vartheta \cos \omega t, & \mathcal{H}_y &= \mathcal{H} \sin \vartheta \sin \omega t, \\ \mathcal{H}_z &= \mathcal{H} \cos \vartheta.\end{aligned}$$

В момент времени $t=0$ проекция спина на направление магнитного поля имела значение $+1/2$. Определить вероятность перехода частицы к моменту времени t в состояние, в котором проекция спина на направление магнитного поля равна $-1/2$.

18. Частица, обладающая спином $1/2$ и магнитным моментом μ , движется в неоднородном магнитном поле вида

$$\mathcal{H}_z = \mathcal{H}_0 + kz, \quad \mathcal{H}_y = -ky, \quad \mathcal{H}_x = 0 \quad (\text{div } \mathcal{H} = 0).$$

а) Найти выражения для зависящих от времени операторов координат x , y , z .

б) Определить средние значения координат и зависимость дисперсии координат от времени, если волновая функция частицы в момент времени $t=0$ имеет вид

$$\psi = \varphi(x, y, z) e^{\frac{i p_x x}{\hbar}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

19. Нейтральная частица находится в пространственно-однородном магнитном поле, изменяющемся во времени лишь по направлению, но не по абсолютной величине.

Написать уравнения для спиновой функции в « ξ »-представлении, где ось ξ направлена вдоль магнитного поля. Показать, что в случае достаточно медленного изменения направления магнитного поля вероятности тех или иных значений проекций момента на направление поля не изменяются.

§ 7. АТОМ

1. Используя неравенство

$$\int |\nabla \psi + Z \psi \nabla r|^2 d\tau \geq 0,$$

найти минимальную энергию одноэлектронного атома и соответствующую этой энергии волновую функцию. Показать, что для основного состояния атома выполняется соотношение $2\bar{T} \geq |\bar{v}|$.

2. Электрон в кулоновом поле ядра заряда Z находится в основном состоянии. Показать, что средний электростатический потенциал в пространстве, создаваемый ядром и электроном, равен

$$\varphi = \frac{e(Z-1)}{r} + e\left(\frac{Z}{a} + \frac{1}{r}\right)e^{-\frac{2Zr}{a}}, \quad \left(a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right).$$

3. Показать, что в основном состоянии атома водорода:

а) наивероятное значение r равно $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$,

б) среднее значение $\frac{1}{r} = \frac{1}{a}$,

в) $\frac{1}{r^2} = \frac{2}{a^2}$.

4. Волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ описывает относительное движение двух частиц: протона и электрона. Пусть координаты центра масс атома водорода точно известны и равны

$$X=0, \quad Y=0, \quad Z=0.$$

Показать, что в этом случае плотность вероятности для протона имеет вид

$$\omega(\mathbf{r}) = \left(\frac{m+M}{m}\right)^3 \left| \psi\left(\frac{m+M}{m}\mathbf{r}\right) \right|^2,$$

где m и M — массы электрона и протона соответственно.

5. Найти распределение по импульсам электрона в атоме водорода для состояний $1s$, $2s$ и $2p$.

6. Вычислить $\bar{r}^2 - \bar{r}^2$ среднее квадратичное отклонение расстояния электрона от ядра для электрона в атоме водорода, находящегося в состоянии с квантовыми числами n, l .

7. Выразить собственную волновую функцию атома водорода в параболических координатах с $n_1 = 1$, $n_2 = 0$,

$m = 0$ через волновые функции в сферических координатах. Показать также, что

$$\psi_{n_1=0, n_2=0, m=n-1}(\xi, \eta, \varphi) = \psi_{n, l=n-1, m=n-1}(r, \vartheta, \varphi).$$

8. Показать непосредственно, что степень вырождения n -го собственного значения энергии атома водорода при решении уравнения Шредингера в параболических координатах равняется n^2 .

9. Найти поправку к уровням энергии атома водорода за счет релятивистской зависимости массы от скорости (учесть член порядка $\frac{v^2}{c^2}$).

10. Из релятивистского уравнения для электрона (уравнения Дирака) следует, что, кроме поправки, учитывающей зависимость массы от скорости ($\sim \frac{v^2}{c^2}$), существует еще один член в гамильтониане

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{2\mu^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} \hat{l} \hat{s},$$

где \hat{l} — оператор орбитального момента, \hat{s} — оператор спина, $U(r)$ — потенциальная энергия электрона (потенциал предполагается центрально-симметричным). Наглядный смысл этого члена заключается в том, что при движении магнитного момента μ (связанного со спином электрона) появляется дипольный электрический момент $\mathbf{d} = \frac{1}{c} [\mathbf{v}\mu]$, который взаимодействует с полем ядра. Найти поправку к уровням энергии атома водорода, учитывающую член H_2 (так называемое взаимодействие спин-орбита).

11. Показать, что квадрупольный момент атома водорода равен

$$Q_0 = -\frac{j - \frac{1}{2}}{j + 1} r^2 \left\{ r^2 = \frac{n^2}{2} (5n^2 + 1 - 3l(l+1)) \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \right)^2 \right\}.$$

12. Определить суммарную вероятность возбуждения и ионизации атома трития H^3 при β -распаде. Вычислить также вероятности возбуждения n -го уровня.

13. Найти энергию основного состояния двухэлектронной системы в поле ядра с зарядом Z вариационным методом. В качестве допустимых волновых функций взять

произведение водородных функций с эффективным зарядом Z' . Релятивистскими поправками пренебречь.

14. Волновую функцию атома гелия с достаточной степенью приближения можно положить равной следующему выражению:

$$\psi = \frac{Z'^3}{\pi a^3} e^{-\frac{Z'(r_1+r_2)}{a}} \quad \left(Z' = \frac{27}{16} \right) \text{ (см. задачу 13 § 7).}$$

Показать, что электростатический потенциал, создаваемый атомом, равен

$$\varphi(r) = 2e \left(\frac{1}{r} + \frac{Z'}{a} \right) e^{-\frac{2Z'r}{a}}.$$

15. Воспользовавшись приближенной волновой функцией основного состояния атома гелия (см. задачу 13 § 7), вычислить диамагнитную восприимчивость гелия.

16. Определить при помощи вариационного метода энергию основного состояния атома лития с учетом обмена. В качестве собственных волновых функций электронов взять водородные функции для электрона в состоянии $1s$ в виде $\psi_{100} = 2Z_1^{3/2} e^{-Z_1 r}$, для электрона в состоянии $2s$ в виде

$$\psi_{200} = c Z_2^{3/2} e^{-\frac{Z_2 r}{2}} (1 - \gamma Z_2 r);$$

Z_1 и Z_2 в этих выражениях являются вариационными параметрами, c определяется из условия нормировки волновой функции ψ_{200} , а γ из условия ортогональности функций ψ_{100} , ψ_{200} . Если бы мы при решении задачи применяли обычную теорию возмущений, то положили бы $Z_1 = Z_2 = 3$. Вводя вариационные параметры Z_1 и Z_2 , мы тем самым учитываем экранирующее действие электронов.

17. Определить смещение энергетических уровней атома вследствие движения ядра. Вычислить величину смещения в атоме гелия для триплетного и синглетного состояний 1 ^3p , воспользовавшись собственными функциями в форме водородноподобных функций отдельных электронов с эффективным зарядом.

18. Потенциальная энергия $U(x, y, z)$ является однородной функцией координат с показателем однородности ν

$$U(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^\nu U(x, y, z).$$

Доказать, что среднее значение кинетической энергии в состоянии дискретного спектра связано со средним значением потенциальной энергии следующим соотношением $2\bar{T} = \nu\bar{U}$ (теорема вириала).

19. Оценить порядок следующих величин согласно модели Томаса — Ферми:

- среднее расстояние между электроном и ядром;
- средняя энергия кулоновского взаимодействия между двумя электронами в атоме;
- средняя кинетическая энергия электрона;
- энергия, необходимая для полной ионизации атома;
- средняя скорость электронов в атоме;
- средний момент количества движения электрона;
- среднее радиальное квантовое число электрона.

20. Выразить приближенно энергию атома через электронную плотность $\rho(\mathbf{r})$ согласно модели Томаса — Ферми *).

21. Показать, что уравнение Томаса — Ферми получается как условие минимума полной энергии при вариации плотности $\rho(\mathbf{r})$.

Указание. Воспользоваться результатом предыдущей задачи. При варьировании $E(\rho)$ учесть условие нормировки

$$\int \rho d\tau = N \quad (\text{для нейтрального атома } N = Z).$$

22. Найти вариационным методом наилучшее приближенное выражение для электронной плотности в модели Томаса — Ферми, беря в качестве допустимых функций

функции вида $\rho = \frac{Ae^{-x}}{x^3}$, $x = \sqrt{\frac{r}{\lambda}}$, где A определяется из условия нормировки $\int \rho d\tau = N$ (для нейтрального атома $N = Z$), а λ — параметр, подлежащий варьированию. Определить энергию атома (иона).

*) В задачах № 20—25 применяется система единиц $e = \hbar = \mu = 1$.

Примечание. При выборе вида допустимых функций учтено то обстоятельство, что точное решение в области малых r имеет особенность вида $\rho \sim \frac{\text{const}}{r^{3/2}}$.

23. Доказать справедливость теоремы вириала для модели Томаса — Ферми.

24. На основании теоремы вириала доказать, что в модели Томаса — Ферми в нейтральном атоме энергия электростатического взаимодействия электронов составляет $\frac{1}{7}$ от величины взаимодействия электронов с ядром.

25. Вычислить энергию полной ионизации атома (иона) в приближении Томаса — Ферми.

26. Определить смещение энергетических уровней атома, возникающее вследствие конечности размеров ядра. Потенциал внутри ядра ($r < a$) считать постоянным (физически это означает, что электрический заряд ядра распределен по поверхности сферы радиуса a).

27. Рассчитать значение $\psi^2(0)$ для валентного s -электрона в атоме с большим Z , используя квазиклассическое приближение.

28. Определить слагаемое напряженности магнитного поля в центре атома водорода, создаваемое орбитальным движением электрона. Вычислить эту величину для состояния $2p$.

29. Как изменится выражение для магнитного момента атома водорода в случае учета движения ядра?

30. Определить расстояние между термами сверхтонкой структуры для s -электрона атома водорода.

31. Определить энергию сверхтонкой структуры одноэлектронного атома, орбитальный момент количества движения которого не равен нулю.

32. Диамагнитный атом находится во внешнем магнитном поле. Определить величину напряженности индуцированного магнитного поля в центре атома.

33. Решить предыдущую задачу в случае гелия.

34. Указать возможные значения полного момента у состояний 1S , 3S , 3P , 2D , 4D .

35. Какие состояния (термы) могут осуществляться для двух электронов а) $nsn's$, б) $nsn'p$, в) $nsn'd$, г) $npn'p$.

36. Указать возможные термы следующих конфигураций: а) $(np)^3$, б) $(nd)^2$, в) $ns(n'p)^4$,

37. Определить основные термы следующих элементов: O, Cl, Fe, Co, As, La. По поводу электронных конфигураций атомов см. Д. И. Блохинцев «Основы квантовой механики», 1949 г., стр. 503—505.

Указание. Для определения необходимо воспользоваться эмпирическими установленными правилами.

1. Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим значением S при данной конфигурации электронов и наибольшим (возможным при этом S) значением L (правило Гунда).

2. Для нормального состояния атома $J = |L - S|$, если в не вполне заполненной оболочке находится не более половины максимально возможного для нее числа электронов и $J = L + S$, если оболочка заполнена более чем наполовину.

38. Определить четность основных термов элементов K, Zn, В, С, N, O, Cl.

39. Система из N электронов характеризуется N тройками квантовых чисел n, l, m_l . Определить число состояний, соответствующих данному значению M_S проекции суммарного спина.

40. Найти число состояний, связанных с конфигурацией nl^x .

41. Показать, что если $x \leq 2l + 1$, то терм с наибольшим значением L для конфигурации nl^x будет синглетным с $L = xl - \frac{1}{4}x(x-2)$, если x четно, или дублетным с $L = xl - \frac{1}{4}(x-1)^2$, если x нечетно.

42. Из волновых функций одноэлектронной проблемы построить собственные функции, характеризующиеся квантовыми числами S, L, M_S, M_L для конфигурации p^3 .

Указание. Рассмотреть действие операторов $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$ и $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$ на антисимметричные функции нулевого приближения.

43. Получить собственные функции для каждого из двух термов 2D конфигурации d^3 .

44. Два электрона движутся в центрально-симметричном поле. Электростатическое взаимодействие электронов будем

считать возмущением. Найти энергию возмущения первого порядка для термов конфигурации $npn'p$.

Указание. Сумма корней векового уравнения равна сумме диагональных элементов, входящих в это уравнение.

45. Показать, что спин-орбитальное возмущение, определяемое формулой $\hat{V}_{SL} = A\hat{S}\hat{L}$, обладает тем свойством, что среднее возмущение всех состояний терма (терм характеризуется числами L и S) равно нулю.

46. Найти расщепление уровней атома в случае слабого магнитного поля, когда $\frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} \ll |\Delta E_{JJ'}|$, где $\Delta E_{JJ'}$ — расстояние между уровнями в мультиплете.

47. Найти пределы изменения множителя Ланде g при заданных значениях L и S .

48. Показать, что для термов ${}^4D_{1/2}$, 5F_1 , ${}^6G_{3/2}$ отсутствует линейное по полю расщепление.

49. Определить множитель Ланде для одноэлектронного атома (водород, щелочные металлы) непосредственно при помощи собственных функций Паули (см. задачу 20 § 4).

50. Выразить магнитный момент атома через множитель Ланде.

51. Определить расщепление терма одноэлектронного атома в случае среднего поля $\frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} \sim |\Delta E_{jj}|$.

52. Найти волновые функции электрона, находящегося в условиях, указанных в предыдущей задаче.

53. Определить расщепление уровней атома водорода, находящегося в сильном магнитном поле $\left(\frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} > |E_{nlj} - E_{nlj'}|\right)$.

Для применения теории возмущений необходимо потребовать, чтобы энергия атома в магнитном поле была мала по сравнению с разностью энергии различных мультиплетов, т. е.

$$\frac{e\hbar \mathcal{H}}{2\mu c} < |E_{nlj} - E_{n'l'j}|.$$

54. Определить зеемановское расщепление компонент сверхтонкой структуры терма ${}^2S_{1/2}$ ($j = 1/2$, $l = 0$) в случае среднего магнитного поля $\left(\frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} \sim |\Delta E_{ff''}|\right)$. (Расщепление, вызываемое полем одного порядка с интервалами сверхтонкой структуры.)

55. Показать, что при произвольном значении напряженности магнитного поля сумма изменений энергий, вызванных магнитным полем, по всем состояниям с заданным M_J равна

$$\frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} M_J \sum \left\{ 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} \right\}.$$

Здесь суммирование производится по J , заключенным в пределах $L+S \leq J \leq |L-S|$, $J \geq M_J$.

56. Показать, что при помещении атома водорода в однородное электрическое поле

а) энергия состояния с квантовыми числами $l = n - 1$, $m = n - 1$ в линейном по полю приближении не изменяется;

б) не меняется положение центра тяжести расщепленного терма;

в) состояния, отличающиеся только знаком проекции момента, имеют одну и ту же энергию.

57. Вычислить расщепление уровней атома водорода в слабом электрическом поле (эффект Штарка мал по сравнению с тонкой структурой).

58. Найти магнитный момент атома водорода, находящегося в слабом электрическом поле.

59. Вычислить расщепление терма с $n = 2$ атома водорода, находящегося в среднем (по величине напряженности) электрическом поле (эффект Штарка и тонкая структура одного порядка).

60. Рассмотрим атом, находящийся под действием возмущающего потенциала u . Применяя теорию возмущений, получим для волновой функции ψ в первом приближении выражение следующего вида:

$$\psi = \psi_0 + \sum_{n \neq 0} \frac{u_{n0}}{E_0 - E_n} \psi_n,$$

а для энергии

$$E = E_0 + u_{00} + \sum_{n=0} \frac{(u_{n0})^2}{E_0 - E_n}.$$

Для того чтобы в дальнейшем применить вариационный метод, упростим, насколько это возможно, вид ψ . Так как

$$\sum_{n \neq 0} u_{n0} \psi_n = -u_{00} \psi_0 + \sum_{n=0} u_{n0} \psi_n = \psi_0 (u - u_{00}),$$

то ψ приближенно запишем следующим образом:

$$\psi \approx \psi_0 \left(1 + \frac{u - u_{00}}{E'} \right),$$

где E' можно в некоторых случаях считать равным среднему значению $E_0 - E_n$. После того, как вид возмущенной волновой функции приближенно установлен, мы можем для определения энергии применить вариационный метод.

Определить вариационным методом энергию атома, находящегося под действием возмущающего потенциала u . Минимум энергии искать в классе допустимых функций вида $\psi = \psi_0(1 + \lambda u)$, где λ — вариационный параметр.

61. Исходя из результата предыдущей задачи, найти формулу для поляризуемости атома. Определить численные значения коэффициента поляризуемости для атомов водорода и гелия, находящихся в основных состояниях.

62. Атом водорода находится в параллельных электрическом и магнитном полях. Найти расщепление в случае

а) слабых полей (энергия штарковского и зеемановского расщепления меньше энергии тонкой структуры);

б) средних полей, для терма с главным квантовым числом $n = 2$.

63. Атом водорода в состоянии с главным квантовым числом $n = 2$ находится во взаимно перпендикулярных электрическом и магнитном полях. Определить расщепление, предполагая, что поля сильные (энергия электрона во внешнем электрическом и магнитном поле больше энергии тонкой структуры).

§ 8. МОЛЕКУЛА

1. Получить уравнение Шредингера для двухатомной молекулы, считая приближенно, что центр тяжести молекулы совпадает с центром тяжести ядер. Для описания движения электронов воспользоваться подвижной системой координат, связанной с ядрами. Спиновые эффекты не учитывать.

2. Решить предыдущую задачу, учитывая спиновые состояния электронов и описывая эти состояния в подвижной системе координат ξ, η, ζ .

3. При малых колебаниях ядер волновую функцию, двухатомной молекулы можно приближенно представить в виде

произведения трех функций $\Phi_{эл}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i, \sigma_i, \rho)$, $f(\rho)$, $\Theta(\theta, \varphi)$. Первая функция определяет движение электронов при закрепленных ядрах, вторая и третья колебательные и вращательные состояния молекулы. Найти уравнения, определяющие колебательные и вращательные части волновой функции двухатомной молекулы.

4. Определить возможные термы двухатомных молекул N_2 , Br_2 , LiH , HBr , CN , которые могут получиться при соединении атомов, находящихся в нормальном состоянии.

5. Найти формулу, определяющую электронные термы при взаимодействии атома гелия с атомом водорода при условии, что оба атома находятся в основных состояниях.

6. Найти колебательный и вращательный спектр энергии двухатомной молекулы, если считать, что ядра движутся в потенциальном поле вида

$$V(r) = -2D \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \right), \quad \text{где } \rho = \frac{r}{a}.$$

7. Эффективный потенциал предыдущей задачи $V(r) + \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} K(K+1)$ вблизи минимума представить в виде потенциала осциллятора и найти энергетические уровни малых колебаний.

8. Определить момент инерции и расстояние между ядрами в молекуле H^1Cl^{35} , если разность частот двух соседних линий во вращательно-колебательной (инфракрасной) полосе H^1Cl^{35} равна $\Delta\nu = 20,9 \text{ см}^{-1}$.

Вычислить соответствующее $\Delta\nu$ в спектре DCl .

9. Вычислить отношение разностей энергии между двумя первыми вращательными и двумя первыми колебательными уровнями молекулы HF . Момент инерции молекулы HF равен $I = 1,35 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$ и частота колебаний $\Delta\nu_{\text{бол.}} = 3987 \text{ см}^{-1}$.

10. Определить энергию диссоциации молекулы D_2 , если энергия диссоциации и нулевая энергия колебания молекулы H_2 равняются $4,46 \text{ эв}$ и $0,26 \text{ эв}$ соответственно.

11. Для аппроксимации хода кривой потенциальной энергии двухатомной молекулы часто употребляется функция $V = D(1 - e^{-2\xi})^2$; $\xi = \frac{r-a}{a}$, предложенная Морзе. Определить энергетический спектр колебаний при $K = 0$.

12. Показать, что оператор квадрата полного момента количества движения двухатомной молекулы может быть

представлен в виде

$$\hat{J}^2 = - \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i M_z \cos \theta \right)^2 \right\} + \hat{M}_z^2.$$

13. Оси ξ , η , ζ являются осями прямоугольной системы координат, жестко связанной с вращающимся твердым телом. Найти вид операторов \hat{J}_ξ , \hat{J}_η , \hat{J}_ζ проекций на оси ξ , η , ζ момента количества движения твердого тела.

14. Доказать, что операторы \hat{J}_ξ , \hat{J}_η , \hat{J}_ζ подчиняются следующим правилам коммутации:

$$\hat{J}_\xi \hat{J}_\eta - \hat{J}_\eta \hat{J}_\xi = -i \hat{J}_\zeta,$$

$$\hat{J}_\eta \hat{J}_\zeta - \hat{J}_\zeta \hat{J}_\eta = -i \hat{J}_\xi,$$

$$\hat{J}_\zeta \hat{J}_\xi - \hat{J}_\xi \hat{J}_\zeta = -i \hat{J}_\eta,$$

т. е. правила коммутации операторов компонент момента во вращающейся системе координат отличаются от правил коммутации в неподвижной системе лишь знаком в правой стороне написанных равенств.

15. В классической механике для случая Эйлера — Пуансо имеем следующие уравнения:

$$A \frac{dp}{dt} + (C - B) qr = 0,$$

$$B \frac{dq}{dt} + (A - C) rp = 0,$$

$$C \frac{dr}{dt} + (B - A) pq = 0$$

или

$$\frac{dJ_\xi}{dt} + \left(\frac{1}{B} - \frac{1}{C} \right) J_\eta J_\zeta = 0 \quad \text{и т. д.}$$

Показать, что в квантовой механике последние соотношения примут вид

$$\frac{d\hat{J}_\xi}{dt} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{B} - \frac{1}{C} \right) (\hat{J}_\eta \hat{J}_\zeta + \hat{J}_\zeta \hat{J}_\eta) = 0 \quad \text{и т. д.}$$

16. Молекулы, имеющие две или несколько осей симметрии третьего или более высокого порядка (например, CH_4), представляют сферический волчок. У таких молекул эллипсоид инерции вырождается в сферу $A = B = C$. Определить уровни энергии сферического волчка.

17. Молекулы с осями симметрии порядка выше второго (например, SO_2 , NH_3 , CH_3Cl) и молекулы с более низкой симметрией или даже вовсе не обладающие симметрией, но для которых два главных момента инерции одинаковы, могут рассматриваться как симметрические волчки $A = B \neq C$.

Определить уровни энергии симметричного волчка.

18. Написать уравнение Шредингера для симметрического волчка.

19. Найти собственные функции оператора

$$\hat{J}^2 = - \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \right) - 2 \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \psi} \right\}.$$

20. Вычислить матричные элементы оператора Гамильтона для асимметрического волчка.

21. Определить уровни энергии асимметрического волчка для $J = 1$.

22. Написать волновые функции асимметрического волчка для случая $J = 1$.

23. Основываясь на свойствах матриц Паули, показать, что даже при учете взаимодействия спин—спин ${}^2\Sigma$ -термы двухатомной молекулы остаются нерасщепленными.

24. Определить мультиплетное расщепление ${}^3\Sigma$ -терма, относящегося к типу связи b .

25. При приближенном решении уравнения Шредингера (см. задачу 3 § 8) оператор

$$\frac{\hbar^2}{2M\rho^2} \left\{ \text{ctg } \theta (\hat{M}_\xi - i\hat{M}_\eta \hat{M}_\zeta - i\hat{M}_\zeta \hat{M}_\eta) + \frac{2}{\sin \theta} \hat{M}_\eta \frac{\partial}{\partial \varphi} + 2\hat{M}_\xi \frac{\partial}{\partial \theta} \right\} = \omega$$

не принимался во внимание, поскольку диагональный элемент этого оператора равен нулю. Учет недиагональных элементов, относящихся к одному и тому же электронному (n, Λ) и вибрационному (v) состоянию, приводит к эффекту, носящему название вращательного искажения спина. Рассматривая оператор ω как возмущение, определить изменение под влиянием этого возмущения уровней дублетного терма.

26. Установить связь между величиной суммарного спина ядер молекулы D_2 , находящейся в Σ -состоянии, и возможными значениями квантового числа K .

27. Определить зеемановское расщепление терма двухатомной молекулы; терм относится к случаю a . Магнитное

поле предполагается малым, т. е. энергия взаимодействия спина с внешним магнитным полем мала по сравнению с разностью энергий между последовательными вращательными уровнями.

28. Определить зеемановское расщепление термина двухатомной молекулы, если терм относится к случаю b , и магнитное поле предполагается таким, что энергия взаимодействия спина с внешним магнитным полем мала по сравнению с энергией взаимодействия спинов — ось.

29. Решить предыдущую задачу в случае, когда энергия взаимодействия спинов — ось мала по сравнению с энергией расщепления, обусловленного внешним магнитным полем.

30. Определить зеемановское расщепление дублетного термина двухатомной молекулы, если терм относится к случаю b и магнитное поле таково, что энергия взаимодействия магнитного момента с этим полем одного порядка с энергией взаимодействия спинов — ось.

31. Определить расщепление в электрическом поле термина двухатомной молекулы, имеющей постоянный дипольный момент p . Расщепляемый терм относится к случаю a .

32. Решить предыдущую задачу для термина, относящегося к случаю b .

33. Определить энергию твердого диполя p , находящегося в однородном электрическом поле \mathcal{E} , рассматривая поле как малое возмущение.

Указание. Воспользоваться соотношением

$$\cos \theta P_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}} P_{l+1, m} + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} P_{l-1, m}.$$

34. При помощи теории возмущений определить закон взаимодействия двух невозбужденных атомов водорода, находящихся на большом расстоянии R друг от друга.

35. Рассмотрим совокупность атомов, распределение зарядов в которых имеет шаровую симметрию. Как было показано в предыдущей задаче, между двумя такими атомами, находящимися на большом расстоянии друг от друга, действуют так называемые дисперсионные силы. Дисперсионные силы имеют квантовый характер, и в отличие от классических поляризационных сил они обладают свойствами аддитивности. Показать, что энергия взаимодействия между двумя такими атомами не зависит от присутствия других

подобных же атомов, т. е. показать, что энергия взаимодействия совокупности атомов составляется аддитивно из энергий взаимодействия между отдельными атомными парами.

§ 9. РАССЕЯНИЕ

1. Найти сечение рассеяния частицы потенциальной ямой при малых скоростях (длина волны де Бройля значительно больше размеров ямы).

2. Определить сечение рассеяния медленных частиц в поле отталкивания

$$U(r) = U_0 \quad (r < a),$$

$$U(r) = 0 \quad (r > a).$$

3. Выразить через фазы рассеяния первые три коэффициента разложения сечения упругого рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ по полиномам Лежандра.

4. Найти фазы рассеяния в поле $U = \frac{A}{r^2}$. Определить сечение рассеяния на малые углы.

5. Рассчитать дифференциальное сечение рассеяния в поле отталкивания $U = \frac{A}{r^2}$ в борновском приближении и согласно классической механике. Определить пределы применимости полученных формул.

6. Найти дискретные уровни для частицы в поле притяжения $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$ при $l = 0$. Определить фазу рассеяния δ_0 для этого потенциала и проанализировать связь между δ_0 и дискретным спектром.

7. Показать, что для кулоновского поля имеется однозначное соответствие между полюсами амплитуды рассеяния и уровнями дискретного спектра.

Указание. Воспользоваться формулой

$$e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma\left(l + 1 + \frac{l}{k}\right)}{\Gamma\left(l + 1 - \frac{l}{k}\right)}.$$

8. Определить в борновском приближении дифференциальное и полное сечение рассеяния в поле

$$а) U(r) = g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r},$$

$$б) U(r) = U_0 e^{-\alpha^2 r^2},$$

$$в) U(r) = U_0 e^{-\alpha r}.$$

9. Используя борновское приближение, найти дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния быстрых электронов

а) атомом водорода; б) атомом гелия.

10. Рассмотреть столкновения одинаковых частиц с энергией взаимодействия $U(r)$. Найти эффективное сечение рассеяния медленных одинаковых частиц в случае короткодействующих сил.

11. Рассчитать сечение упругого рассеяния электрона на электроном и α -частицы на α -частице.

12. Рассеяние нейтронов на протонах зависит от суммарного спина нейтрона и протона. При малых энергиях сечение в случае триплетного соотношения ($S=1$) равно $\sigma_{\text{трипл}} = 4\pi |f_3|^2 \approx 2 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$, а в случае синглетного ($S=0$) $\sigma_{\text{сингл}} = 4\pi |f_1|^2 \approx 78 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$.

Введем оператор

$$\hat{f} = \frac{f_1 + 3f_3}{4} + \frac{f_3 - f_1}{4} (\hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p).$$

Как легко видеть, в случаях триплетного и синглетного состояний его собственные значения равны f_3 и f_1 соответственно. Для того чтобы определить сечение рассеяния при произвольной поляризации нейтронов, необходимо усреднить оператор \hat{f}^2 :

$$\sigma = 4\pi \overline{\hat{f}^2}.$$

Пусть спиновое состояние падающих нейтронов описывается функцией $\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta \end{pmatrix}$ (направление спина нейтрона задается полярными углами $\Theta = 2\beta$, $\Phi = 2\alpha + \frac{\pi}{2}$; см. задачу 11 § 4),

а спиновое состояние протонов функцией $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (спины протонов направлены по оси z). Определить для этого случая сечение рассеяния нейтронов на протонах.

13. Найти вероятность того, что рассеянный на протоне медленный нейтрон изменит ориентацию своего спина, если до столкновения спины нейтронов были направлены по оси z , а спины протонов — в противоположном направлении.

14. Амплитуда рассеяния медленных нейтронов с энергиями заметно меньше тепловых ($\lambda > 10^{-8}$ см, т. е. длина волны падающих нейтронов велика по сравнению с взаимными расстояниями протонов в молекуле) на молекуле водорода равна сумме амплитуд для обоих протонов.

Таким образом,

$$\hat{f} = \frac{f_1 + 3f_3}{2} + \frac{f_3 + f_1}{4} \{ \hat{\sigma}_n (\hat{\sigma}_{p_1} + \hat{\sigma}_{p_2}) \}.$$

Протоны в молекуле водорода могут находиться как в состоянии с параллельными спинами (ортоводород), так и в состоянии с антипараллельными спинами (пароводород).

Определить сечение рассеяния нейтронов на пароводороде и ортоводороде.

15. Определить полное сечение упругого рассеяния непроницаемой сферой радиуса a для быстрых частиц (длина волны де Бройля $\lambda \ll a$).

16. Доказать следующие свойства амплитуды рассеяния при энергии $E \rightarrow 0$ (длины рассеяния):

- а) в поле отталкивания длина рассеяния отрицательна;
- б) в поле притяжения, если нет дискретных уровней, длина рассеяния положительна;
- в) длина рассеяния обращается в ∞ , если при углублении потенциальной ямы появляется новый уровень.

Указание. Если от уравнения Шредингера перейти к эквивалентному интегральному уравнению ($E = 0$)

$$\psi = 1 - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau',$$

то для асимптотического вида ψ получаем

$$\psi = 1 + \frac{a}{r},$$

где длина рассеяния

$$a = - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \psi U d\tau$$

выражена через потенциальную энергию и $\psi_{E=0}$.

17. Рассмотреть упругое рассеяние частиц со спином $1/2$ на скалярной (спин равен нулю) частице. Найти дифференциальное сечение рассеяния с переориентацией спина. Рассмотреть рассеяние S и P волн.

18. Доказать, что в общем случае неупругого рассеяния имеет место следующая формула, связывающая величину полного сечения $\sigma = \sigma_{\text{упр}} + \sigma_{\text{неупр}}$ и амплитуду упругого рассеяния при $\vartheta = 0$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0).$$

Указание. Воспользоваться разложениями этих величин в ряды по орбитальному моменту:

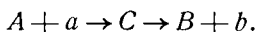
$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(\tau_l - 1) P_l(\cos \vartheta),$$

$$\sigma_{\text{упр}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \tau_l|^2,$$

$$\sigma_{\text{неупр}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - |\tau_l|^2).$$

19. Рассмотрим предельный случай так называемого «черного» ядра. Радиус ядра R пусть будет велик в сравнении с де-бройлевской длиной волны нейтронов. Будем считать, что все нейтроны, попадающие в ядро, поглощаются. Определить полные сечения рассеяния и поглощения.

20. Рассмотрим ядерную реакцию



Как будет выглядеть угловое распределение продуктов ядерной реакции в системе центра инерции или, что то же самое, в системе промежуточного ядра C в нижеперечисленных случаях. Если равен нулю:

а) спин промежуточного ядра;

б) орбитальный момент относительного движения продуктов реакции;

в) орбитальный момент относительного движения сталкивающихся частиц (спин промежуточного ядра не равен нулю).

21. Найти собственные функции операторов квадрата и проекции полного изотопического спина I^2 и I_z системы нуклон—мезон *).

22. В системе центра инерции рассеяние мезонов на нуклонах сводится к рассеянию частиц на неподвижном рассеивающем центре. Тогда вдали от центра падающая волна с определенным значением проекции спина S_z и проекции изотопического спина τ_z запишется в виде

$$e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z).$$

Здесь π_i принимает значения:

$$\begin{aligned} \pi_i = 1 & \text{ для } \pi^+ \text{-мезона,} & \delta(\pi - 1) &= \varphi_+, \\ \pi_i = 0 & \text{ для } \pi^0 \text{-мезона,} & \delta(\pi) &= \varphi_0, \\ \pi_i = -1 & \text{ для } \pi^- \text{-мезона,} & \delta(\pi + 1) &= \varphi_-, \end{aligned}$$

τ_z принимает значения:

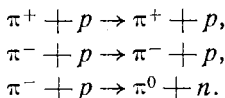
$$\begin{aligned} \tau_z = \frac{1}{2} & \text{ для протона,} & \delta\left(n - \frac{1}{2}\right) &= \psi_p, \\ \tau_z = -\frac{1}{2} & \text{ для нейтрона,} & \delta\left(n + \frac{1}{2}\right) &= \psi_n. \end{aligned}$$

Разложить падающую волну по собственным функциям операторов J^2 , J_z , I^2 , I_z .

Указание. В системе мезон—нуклон интегралами движения являются четность $(-1)^l$, полный момент J , изотопический спин I .

Так как полный спин в такой системе равен $\frac{1}{2}$, то сохраняется также и орбитальный момент l . Поэтому при разложении падающей волны по собственным функциям операторов сохраняющихся величин можно вместо суммирования по J , I суммировать по l , I .

23. Найти амплитуды рассеяния π -мезонов на нуклонах, выраженные через фазы, для следующих реакций:



*) См. приложение II.

24. Показать, что амплитуды рассеяния для всех возможных реакций мезона с нуклоном выражаются через написанные в задаче 23 в силу гипотезы об изотопической инвариантности.

Выразить их через амплитуды рассеяния для состояний с изотопическим спином $3/2$ и $1/2$.

25. Выразить через фазы полные сечения реакций:

$$\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p,$$

$$\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p,$$

$$\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + n.$$

26. В области малых энергий, когда длина волны мезона значительно больше радиуса сил взаимодействия между мезоном и нуклоном, основной вклад в рассеяние вносят лишь S - и P -волны.

Найти дифференциальное сечение рассеяния, выраженное через фазы, для реакций:

$$\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p,$$

$$\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p,$$

$$\pi^- + p \rightarrow \pi^0 + n.$$

27. Пучок π -мезонов рассеивается на неполяризованной мишени из протонов, т. е. в мишени число протонов с $S_z = 1/2$ равно числу протонов с $S_z = -1/2$. Оказывается, что при рассеянии неполяризованные вначале протоны поляризуются. Определить величину поляризации протонов, учитывая только S - и P -волны.

ОТВЕТЫ И РЕШЕНИЯ

§ 1. ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ. СПЕКТР ЭНЕРГИИ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

1.

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

3.

$$|a(p)|^2 = \frac{4n^2 \pi a}{\hbar} \frac{1}{\left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} - n^2 \pi^2\right)^2} \begin{cases} \cos^2 \frac{pa}{2\hbar} & \text{при } n \text{ нечетном,} \\ \sin^2 \frac{pa}{2\hbar} & \text{при } n \text{ четном.} \end{cases}$$

4.

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (E - V_1) \psi = 0 \quad (x < 0),$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + E \psi = 0 \quad (0 < x < a),$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (E - V_2) \psi = 0 \quad (x > a).$$

Вводя обозначения

$$\kappa_1 = \frac{\sqrt{2\mu(V_1 - E)}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}, \quad \kappa_2 = \frac{\sqrt{2\mu(V_2 - E)}}{\hbar},$$

находим, что общее решение в каждой области имеет следующий вид:

$$\psi = A_1 e^{-\kappa_1 x} + B_1 e^{\kappa_1 x} \quad (x < 0),$$

$$\psi = A e^{-\kappa x} + B e^{\kappa x} \quad (0 < x < a),$$

$$\psi = A_2 e^{-\kappa_2 x} + B_2 e^{\kappa_2 x} \quad (x > a).$$

Рассмотрим дискретный спектр $E < V_2$. Тогда χ_1 и χ_2 — действительные величины. Полагая в области $0 < x < a$ $x = ik$, где k — действительно, запишем решение в виде

$$\psi = \sin(kx + \delta) \quad (0 < x < a).$$

В силу конечности волновой функции $A_1 = 0$, $B_2 = 0$.

Условие непрерывности ψ и $\frac{d\psi}{dx}$ удобнее записать как условие непрерывности логарифмической производной $\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx}$

$$\chi_1 = k \operatorname{ctg} \delta,$$

$$-\chi_2 = k \operatorname{ctg}(ka + \delta).$$

Перепишем последние два условия, выразив χ_1 и χ_2 через k

$$\sqrt{\frac{2\mu V_1}{\hbar^2 k^2}} - 1 = \operatorname{ctg} \delta,$$

$$-\sqrt{\frac{2\mu V_2}{\hbar^2 k^2}} - 1 = \operatorname{ctg}(ka + \delta).$$

Поскольку ctg является периодической функцией с периодом π , величину δ и $ka + \delta$ можно представить в следующем виде:

$$\delta = \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}} + n_1\pi,$$

$$ka + \delta = -\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}} + n_2\pi.$$

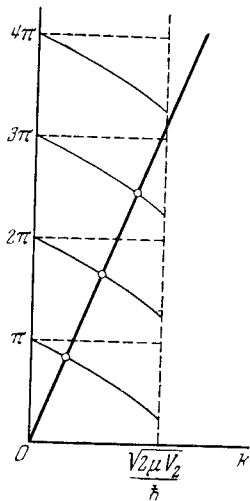
Рис. 18.

Причем значения \arcsin лежат в области от 0 до $\frac{\pi}{2}$. Исключая δ , находим трансцендентное уравнение для определения уровней энергии в дискретном спектре

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}} - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}}, \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} > 0.$$

Значения k , удовлетворяющие этому уравнению, удобно находить графически. Эти значения определяются точками пересечения прямой $y = ak$ и кривыми

$$y = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}} - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}} \quad (\text{см. рис. 18}).$$



Рассмотрим симметричную потенциальную яму $V_1=V_2=V$. Легко видеть, что в этом случае при любых V и a всегда имеется по крайней мере один уровень. Если $\frac{V\sqrt{2\mu}V}{\hbar}a \ll 1$, то нетрудно найти значение единственного дискретного энергетического уровня. Производя разложение $\pi - 2 \arcsin \sqrt{\frac{E}{V}}$ в ряд, получим $E = V - \frac{\mu a^2}{2\hbar^2} V^2$. Число уровней при любых значениях V и a будет равно N , где N находится из соотношения

$$N > \frac{V\sqrt{2\mu}Va}{\pi\hbar} > N - 1.$$

5. б) Собственные значения оператора \hat{H}' всегда положительны. Поэтому если ψ_0 — волновая функция, соответствующая состоянию с минимальной энергией, то

$$(\hat{Q} + i\hat{P})\psi_0 = 0 \quad \text{или} \quad \left(\frac{\partial}{\partial Q} + Q\right)\psi_0 = 0.$$

Отсюда находим, что

$$\psi_0 = c_0 e^{-\frac{Q^2}{2}}, \quad \varepsilon_0 = \frac{1}{2}.$$

Таким образом, энергия осциллятора равна

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \quad (n \geq 0),$$

а соответствующая волновая функция имеет вид

$$\psi_n = A \left(\frac{\partial}{\partial Q} - Q\right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}}.$$

Нормировочную постоянную A_n определяем из условия $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(Q) dQ = 1$. Для основного состояния нормировочная

постоянная A_0 равна $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{Q^2}{2}}.$$

Волновую функцию n -го состояния можно выразить через волновую функцию $n-1$ -го состояния следующим образом:

$$\psi_n(Q) = c_n (\hat{O} - i\hat{P}) \psi_{n-1}(Q),$$

где c_n определяется из условия

$$c_n^2 \int [(Q - iP) \psi_{n-1}(Q)]^2 dQ = 1.$$

Заменяя P на $-i \frac{\partial}{\partial Q}$ и интегрируя по частям, находим:

$$c_n^2 \int \psi_{n-1} (P^2 + Q^2 + 1) \psi_{n-1} dQ = c_n^2 \cdot 2n = 1,$$

откуда $c_n = \frac{1}{\sqrt{2n}}$ и

$$\begin{aligned} \psi_n &= c_n \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right) \psi_{n-1} = \\ &= c_n \cdot c_{n-1} \dots c_1 \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n \psi_0 = A_n \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n \psi_0. \end{aligned}$$

Окончательно получаем:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}}.$$

Полином степени n

$$H_n(Q) = e^{\frac{Q^2}{2}} \left(Q - \frac{\partial}{\partial Q} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}}$$

называется полиномом Эрмита — Чебышева.

в)

$$\hat{a} \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a} = 1; \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \psi_0;$$

г)

$$(\hat{P} + i\hat{Q})_{n-1}^n \cdot [(\hat{P} - i\hat{Q})_{n-1}^n]^* = 2n.$$

Волновые функции ψ_n выбраны нами действительными, поэтому матричные элементы \hat{Q} и $i\hat{P} = \frac{\partial}{\partial Q}$ будут тоже действительные

$$(\hat{Q})_{n-1}^n = \sqrt{\frac{n}{2}},$$

$$(\hat{P})_{n-1}^n = i \sqrt{\frac{n}{2}},$$

или, возвращаясь к прежним переменным, имеем:

$$\begin{aligned}(\hat{x})_{n-1}^n &= (\hat{x})_n^{n-1} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2\mu\omega}}, \\(\hat{p})_{n-1}^n &= -(\hat{p})_n^{n-1} = i \sqrt{\frac{n\mu\hbar\omega}{2}}.\end{aligned}$$

7. Искомая вероятность

$$w = \frac{\int_1^{\infty} e^{-y^2} dy}{\int_0^{\infty} e^{-y^2} dy} \approx 0,16.$$

8. Волновая функция должна обращаться в нуль при $x=0$. При $x > 0$ она удовлетворяет дифференциальному уравнению обычного осциллятора. Нетрудно видеть, что волновые функции осциллятора при нечетном $n=2k+1$ обращаются в нуль при $x=0$ и в области $x \geq 0$ дают решение рассматриваемой задачи. Следовательно,

$$E_k = \hbar\omega \left(2k + \frac{3}{2}\right) \quad (k=0, 1, 2, \dots)$$

9.

$$\begin{aligned}\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{\mu\omega^2\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2}\right) a_n(p) &= E_n a_n(p), \\|a_n(p)|^2 &= \frac{1}{2^n \cdot n! \sqrt{\pi\mu\omega\hbar}} e^{-\frac{p^2}{\mu\omega\hbar}} H_n^2\left(\frac{p}{\sqrt{\mu\omega\hbar}}\right).\end{aligned}$$

10. Исследование поведения при $x \rightarrow \infty$ решения уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left[E - V_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2\right] \psi = 0$$

показывает, что ψ имеет асимптотический вид $\psi \sim \exp(-\xi)$, где ξ — новая независимая переменная

$$\xi = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar a} x^2.$$

При $x \rightarrow 0$ ψ пропорциональна ξ^{ν} , где

$$\nu = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} + 1 \right).$$

Делаем подстановку

$$\psi = e^{-\xi/2} \xi^{\nu/2} u(\xi)$$

и получаем для $u(\xi)$ следующее уравнение:

$$\xi u'' + \left(\nu + \frac{1}{2} - \xi \right) u' - \left[\frac{\nu}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\mu a (E + 2V_0)}{2\hbar \sqrt{2\mu V_0}} \right] u = 0. \quad (1)$$

Уравнение (1) есть уравнение для вырожденной гипергеометрической функции и общее его решение имеет вид

$$u(\xi) = c_1 F\left(\alpha, \nu + \frac{1}{2}, \xi\right) + c_2 F\left(\alpha - \nu + \frac{1}{2}, \frac{3}{2} - \nu, \xi\right) \cdot \xi^{\frac{1}{2} - \nu},$$

где через α обозначено выражение в квадратной скобке в уравнении (1).

Из требования ограниченности $\psi(0)$ вытекает

$$c_2 = 0.$$

Кроме того, надо потребовать, чтобы волновая функция при $x \rightarrow \infty$ убывала, т. е. чтобы функция $u(\xi)$ сводилась к полиномам. Этого можно достигнуть, полагая $\alpha = -n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), откуда находим уровни энергии

$$E_n = \frac{2\hbar}{a} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu}} \left\{ n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} \right) \right\}.$$

Таким образом, энергетический спектр (при соответствующем выборе начала отсчета энергии) такой же, как у осциллятора с циклической частотой $\omega = \sqrt{\frac{8V_0}{\mu a^2}}$. Интересно отметить, что нулевая энергия частицы для потенциала $V_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a}\right)^2$ всегда превышает нулевую энергию соответствующего осциллятора. Волновые функции имеют вид

$$\psi_n = c_n x^\nu e^{-\sqrt{\frac{\mu V_0}{2\hbar^2 a^2}} x^2} F\left(-n, \nu + \frac{1}{2}, \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 a^2}} x^2\right),$$

где $\nu = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} + 1 \right)$, а постоянные c_n могут быть найдены из условия нормировки.

11. В уравнении Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(E + \frac{V_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{a}} \right) \psi = 0$$

сделаем подстановку

$$\psi = \left(\operatorname{ch} \frac{x}{a} \right)^{-2\lambda} u, \quad \lambda = \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 1 \right).$$

Уравнение для u примет следующий вид:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{4\lambda}{a} \operatorname{th} \frac{x}{a} \frac{du}{dx} + \frac{4}{a^2} (\lambda^2 - x^2) u = 0,$$

где

$$x = \sqrt{-\frac{\mu E a^2}{2\hbar^2}}$$

(рассматриваем дискретный спектр $E < 0$).

Если ввести новую независимую переменную

$$z = -\operatorname{sh}^2 \frac{x}{a},$$

то это уравнение приводится к гипергеометрическому уравнению

$$z(1-z) \frac{d^2u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)z \right] \frac{du}{dz} - (\lambda^2 - x^2) u = 0. \quad (1)$$

Параметры α , β , γ , входящие в гипергеометрическое уравнение общего вида

$$z(1-z) \frac{d^2u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z] \frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0$$

имеют в нашем случае следующие значения:

$$\gamma = \frac{1}{2}, \quad \alpha = x - \lambda, \quad \beta = -x - \lambda.$$

Два решения уравнения (1), которые дают соответственно четные и нечетные волновые функции ψ , имеют вид

$$u_1 = F\left(-\lambda + x, -\lambda - x, \frac{1}{2}; z\right), \quad (2)$$

$$u_2 = \sqrt{z} F\left(-\lambda + x + \frac{1}{2}, -\lambda - x + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; z\right). \quad (3)$$

Эти решения приводят к ограниченным значениям волновых функций при $x = 0$ ($z = 0$).

Для того чтобы волновая функция

$$\psi = \left(\operatorname{ch} \frac{x}{a} \right)^{-2\lambda} u$$

обращалась в нуль при $x \rightarrow \pm \infty$ ($z \rightarrow -\infty$), гипергеометрические функции в выражениях (2) и (3) должны сводиться к полиномам. Это условие означает, например, для u_1 , что либо $\lambda = x$, либо $\lambda + x$ являются целыми неотрицательными числами. Однако второй случай должен быть отброшен, так как при этом волновая функция при $x \rightarrow \pm \infty$ экспоненциально возрастает. Итак, получаем $\lambda = x = k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) и уровни энергии

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 2k - \frac{1}{2} \right]^2.$$

Аналогично этому для выражения (3) находим, что условие конечности волновой функции при $x \rightarrow \pm \infty$ выполняется, если

$$\lambda = x = \frac{1}{2} = l \quad (l = 0, 1, 2, \dots)$$

откуда

$$E_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - (2l + 1) - \frac{1}{2} \right]^2.$$

Объединяя эти выражения, находим:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots).$$

Число дискретных уровней равно наибольшему целому числу N , удовлетворяющему неравенству

$$N < \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \frac{1}{2}.$$

Отметим, что полученный спектр энергий совпадает при соответствующем выборе параметров со спектром для потенциала Морза (см. задачу 11 § 8).

12. В волновом уравнении

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(E - V_0 \operatorname{ctg}^2 \frac{\pi}{a} x \right) \psi = 0$$

сделаем подстановку

$$\psi = \left(\sin \frac{\pi}{a} x \right)^{-2\lambda} u.$$

Полагая

$$\lambda = \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\pi^2 \hbar^2} + 1} - 1 \right),$$

$$\nu = \sqrt{\frac{\mu a^2}{2\hbar^2 \pi^2} (E + V_0)},$$

приходим к следующему уравнению для u :

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - 4 \frac{\pi}{a} \lambda \operatorname{ctg} \frac{\pi x}{a} \frac{du}{dx} + \frac{4\pi^2}{a^2} (\nu^2 - \lambda^2) u = 0.$$

Введением независимой переменной

$$z = \cos^2 \frac{\pi x}{a}$$

последнее уравнение приводится к гипергеометрическому

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)z \right] \frac{du}{dz} + (\nu^2 - \lambda^2) u = 0. \quad (1)$$

Сравнивая с общим видом гипергеометрического уравнения

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z] \frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0,$$

находим параметры:

$$\gamma = \frac{1}{2}, \quad \alpha = -\nu - \lambda, \quad \beta = \nu - \lambda.$$

Уравнение (1) имеет два решения. Одно из этих решений отлично от нуля и конечно при $z=0$ (этому значению соответствует $x = \frac{a}{2}$)

$$u_1 = F\left(-\nu - \lambda, \nu - \lambda, \frac{1}{2}; z\right).$$

Другое решение

$$u_2 = \sqrt{z} F\left(-\nu - \lambda + \frac{1}{2}, \nu - \lambda + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; z\right)$$

обращается в нуль при $z=0$ ($x = \frac{a}{2}$). Чтобы определить поведение решений при $z=1$ (это значение соответствует

двум значениям $x = 0$, $x = a$), воспользуемся соотношением $F(\alpha, \beta, \gamma; z) = (1-z)^{-\alpha} F(\alpha, \gamma - \beta, \gamma; \frac{z}{z-1})$. Для u_1 и u_2 получаем:

$$u_1 = (1-z)^{\nu+\lambda} F\left(-\nu-\lambda, -\nu+\lambda+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{z}{z-1}\right), \quad (2)$$

$$u_2 = \sqrt{z}(1-z)^{\nu+\lambda-\frac{1}{2}} \times \\ \times F\left(-\nu-\lambda+\frac{1}{2}, -\nu+\lambda+1, \frac{3}{2}; \frac{z}{z-1}\right). \quad (3)$$

Для того чтобы выполнялось условие обращения в нуль волновой функции ψ при $x = 0$ и $x = a$, необходимо, чтобы ряды по степеням $\frac{z}{z-1}$ содержали конечное число членов.

Гипергеометрический ряд в выражении (2) для u_1 обрывается, если либо

$\nu + \lambda$ — целое положительное число или нуль, либо

$\nu - \lambda - \frac{1}{2}$ — целое положительное число или нуль.

Однако условию $\psi = 0$ при $x = 0$, $x = a$ удовлетворяет только второй случай

$$\nu - \lambda - \frac{1}{2} = k \quad (k = 0, 1, \dots).$$

Уровни энергии при этом

$$E_k = [(2k+1)^2 + 4(2k+1)\lambda - 2\lambda] \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}. \quad (4)$$

Аналогичное рассмотрение выражения (3) показывает, что уровни энергии определяются условием

$$\nu - \lambda = l \quad (l = 1, 2, 3, \dots). \quad (5)$$

Выражения для уровней энергии (4) и (5) могут быть объединены

$$E_n = (n^2 + 4n\lambda - 2\lambda) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

При этом нечетным значениям n соответствуют волновые функции

$$\psi_n = c_n \left(\sin \frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda} F\left(-\frac{n}{2} - 2\lambda, \frac{n}{2}, \frac{1}{2}; \cos^2 \frac{\pi x}{a}\right),$$

а четным n соответствуют

$$\psi_n = c_n \left(\sin \frac{\pi x}{a} \right)^{-2\lambda} \cos \frac{\pi x}{a} \times \\ \times F \left(-\frac{n}{2} - 2\lambda + \frac{1}{2}, \frac{n}{2} + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \cos^2 \frac{\pi x}{a} \right).$$

Нормированная волновая функция основного состояния

$$\psi = \sqrt{\frac{\pi \Gamma(2\lambda + 1)}{a \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(2\lambda + \frac{3}{2}\right)}} \left(\sin \frac{\pi x}{a} \right)^{2\lambda + 1}, \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

Рассмотрим предельный случай $V_0 \rightarrow 0$. При этом задача сводится к задаче с частицей в потенциальном ящике (см. задачу 1, § 1). Величина λ обращается в нуль и для уровней энергии получим, как и следовало ожидать, значения

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} n^2.$$

В противоположном случае $\lambda \gg 1$ для низших уровней ($n \ll \lambda$)

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

где

$$\omega = \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}.$$

Этот же результат можно получить, разлагая потенциальную энергию вблизи точки $x = \frac{a}{2}$ и ограничиваясь квадратичными членами.

13. В рассматриваемом случае имеется только непрерывный энергетический спектр и собственные функции вырождены.

Перейдем в уравнении Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - [E + Fx]\psi = 0$$

от координатного представления к импульсному; получим:

$$\frac{p^2}{2\mu} a(p) - E a(p) = i\hbar F \frac{d}{dp} a(p).$$

Решение этого уравнения, принадлежащее собственному значению E , $a_E(p) = ce^{-\frac{i}{\hbar F}(\frac{p^3}{6\mu} - Ep)}$ представляет собой волновую функцию в импульсном представлении. Произведем нормировку функций $a(p)$ на $\delta(E - E')$:

$$\int a_E^*(p) a_{E'}(p) dp = \delta(E - E'),$$

т. е.

$$cc^* \int e^{-\frac{ip}{\hbar F}(E - E')} dp = cc^* 2\pi\hbar F \delta(E - E'),$$

откуда

$$c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}.$$

Волновая функция в координатном представлении

$$\psi(x) = \frac{\alpha}{2\pi\sqrt{F}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{u^3}{3} - iuq} du = \frac{\alpha}{\pi\sqrt{F}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} - uq\right) du,$$

$$q = \left(x + \frac{E}{F}\right)\alpha, \quad \alpha = \left(\frac{2\mu F}{\hbar^2}\right)^{1/3}.$$

Этот интеграл можно выразить через функцию Эйри $\Phi(q)$:

$$\Phi(q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{u^3}{3} + uq\right) du, \quad \psi(x) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi F}} \Phi(-q).$$

14. Оператор Гамильтона при данном потенциале имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} p^2 + \frac{1}{2} V_0 e^{bh} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{2} V_0 e^{-bh} \frac{\partial}{\partial p}.$$

Так как

$$e^{bh} \frac{\partial}{\partial p} a(p) = a(p + bh),$$

то уравнение Шредингера будет представлено в виде уравнения в конечных разностях

$$\frac{1}{2\mu} p^2 a(p) + \frac{1}{2} V_0 a(p + bh) + \frac{1}{2} V_0 a(p - bh) = E a(p).$$

15.

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 a(k) + \sum_{-\infty}^{+\infty} V_n a\left(k + \frac{2\pi n}{b}\right) = E a(k)$$

$$\left(k = \frac{p}{\hbar}, V(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} V_n e^{-\frac{2\pi n i x}{b}}, V_n = V_{-n}^*\right).$$

16. Волновая функция в области ямы $0 < x < a$ имеет вид

$$\psi = c_1 e^{i x_1 x} + c_2 e^{-i x_1 x}, \quad x_1 = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar},$$

а в области барьера $-b < x < 0$

$$\psi = c_3 e^{i x_2 x} + c_4 e^{-i x_2 x}, \quad x_2 = \frac{\sqrt{2\mu(E - V_0)}}{\hbar}.$$

Так как $\psi(x) = \text{const} \cdot \psi(x + l)$ (const равна по модулю единице, $l = a + b$), то в области следующего барьера $a < x < a + b$

$$\psi = e^{i k l} (c_3 e^{i x_2 (x-l)} + c_4 e^{-i x_2 (x-l)}).$$

Из требования непрерывности волновой функции и ее первой производной в точках $x = 0$, $x = a$ получаем четыре уравнения:

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= c_3 + c_4, \\ c_1 e^{i x_1 a} + c_2 e^{-i x_1 a} &= e^{i k l} (c_3 e^{-i x_2 b} + c_4 e^{i x_2 b}), \\ x_1 (c_1 - c_2) &= x_2 (c_3 - c_4), \\ x_1 (c_1 e^{i x_1 a} - c_2 e^{-i x_1 a}) &= x_2 (c_3 e^{-i x_2 b} - c_4 e^{i x_2 b}) e^{i k l}. \end{aligned}$$

Эта система имеет нетривиальное решение только тогда, когда

$$\cos kl = \cos x_1 a \cdot \cos x_2 b - \frac{x_1^2 + x_2^2}{2x_1 x_2} \sin x_1 a \cdot \sin x_2 b. \quad (1)$$

Исследуем два случая:

а) $E < V_0$, x_2 — мнимая величина.

Введя обозначение $x_2 = i x$, перепишем уравнение (1) в виде

$$\cos kl = \cos x_1 a \cdot \text{ch } x b + \frac{x^2 - x_1^2}{2x_1 x} \sin x_1 a \cdot \text{sh } x b. \quad (2)$$

Таким образом, разрешенные зоны энергии определяются из соотношения

$$-1 \leq \cos \kappa_1 a \cdot \operatorname{ch} \kappa b + \frac{\kappa^2 - \kappa_1^2}{2\kappa_1 \kappa} \sin \kappa_1 a \cdot \operatorname{sh} \kappa b \leq 1.$$

Для выяснения общих закономерностей в расположении разрешенных зон рассмотрим предельный случай

$$\frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} b \ll 1, \quad a \gg b, \quad E \ll V_0.$$

Введем обозначение $\frac{\mu V_0}{\hbar^2} ab = \gamma$. Тогда соотношение (2) приближенно будет иметь вид

$$\cos ka = \gamma \frac{\sin \kappa_1 a}{\kappa_1 a} + \cos \kappa_1 a. \quad (3)$$

На рис. 19 изображена функция $\left(\gamma \frac{\sin \kappa_1 a}{\kappa_1 a} + \cos \kappa_1 a \right)$ на оси абсцисс отложены значения $\kappa_1 a$. Дозволенные зоны энергии отмечены на оси $\kappa_1 a$ жирными линиями.

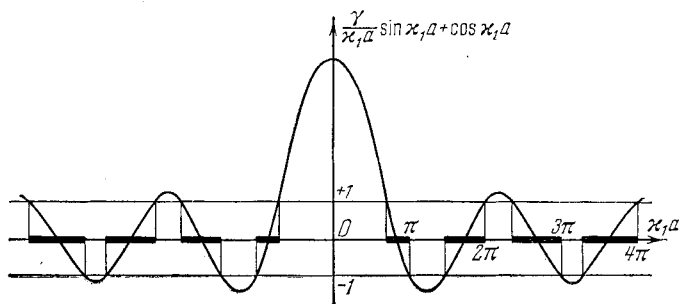


Рис. 19.

В каждой точке $\kappa_1 a = n\pi$ справа примыкает зона запрещенной энергии. Из приведенного графика видно, что запрещенные зоны энергии с возрастанием номера зоны делаются уже. Легко оценить ширину запрещенных зон. Левая часть выражения (3) принимает значения $(-1)^n$, когда

$$\cos(\kappa_1 a - \varphi) = (-1)^n \cos \varphi, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{\gamma}{\kappa_1 a},$$

что возможно при $x_1 a = n\pi$ и при $x_1 a = n\pi + 2\varphi$. Отсюда следует, что ширина запрещенных зон энергии составляет 2φ . При больших значениях n

$$2\varphi \approx \frac{\gamma}{n\pi}.$$

б) $E > V_0$. В этом случае энергетические зоны определяются из соотношения

$$-1 \leq \cos x_1 a \cdot \cos x_2 b - \frac{x_1^2 + x_2^2}{2x_1 x_2} \sin x_1 a \cdot \sin x_2 b \leq +1.$$

17. Уровни энергии E_n определяются из правила квантования Бора

$$\int_{x_1}^{x_2} p dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar, \quad (1)$$

где

$$p = \sqrt{2\mu \left(E_n + \frac{V_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{a}} \right)}$$

x_1 и x_2 — точки поворота, определяемые из условия $p = 0$ (при этом $E_n < 0$ для рассматриваемого случая дискретного спектра). Для вычисления интеграла

$$I(E) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu \left(E + \frac{V_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{a}} \right)} dx$$

дифференцируем обе части по E . При этом производная от интеграла по верхнему и нижнему пределам обращается в нуль, так как в точках x_1 и x_2 подкоренное выражение равно нулю.

Таким образом,

$$\frac{dI}{dE} = \mu \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{2\mu \left(E + \frac{V_0}{\operatorname{ch}^2 \frac{x}{a}} \right)}}.$$

Заменой переменной $\text{sh} \frac{x}{a} = z$ последний интеграл приводится к следующему виду:

$$\frac{dI}{dE} = \mu a \int_{z_1}^{z_2} \frac{dz}{\sqrt{2\mu [E(1+z^2) + V_0]}} = \frac{\mu a}{\sqrt{-2\mu E}} \pi.$$

Отсюда находим

$$I(E) = -\sqrt{-2\mu a^2 E} \pi + C.$$

Постоянная C определяется из того условия, что при $E = -V_0$ область интегрирования стягивается в точку и

$$I(-V_0) = 0,$$

откуда

$$I(E) = \sqrt{2\mu a^2} (\sqrt{V_0} - \sqrt{-E}) \pi.$$

Таким образом, в квазиклассическом приближении уровни энергии определяются следующим выражением:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\sqrt{\frac{2\mu a^2 V_0}{\hbar^2}} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2 \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (2)$$

Число уровней $N = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar} a$. Отметим, что вычисление уровней энергии с помощью правила квантования (1) является законным, если число уровней велико, т. е.

$$\frac{2\mu a^2 V_0}{\hbar^2} \gg 1.$$

При выполнении этого условия выражение для уровней энергии (2) совпадает с точной формулой для E_n , полученной в задаче 11, § 1.

$$18. \text{ а) } E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots),$$

$$\text{ б) } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} \left[\sqrt{\frac{2\mu a^2 V_0}{\pi^2 \hbar^2}} + \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2 - V_0 \\ (n = 0, 1, 2, \dots).$$

19. Среднее значение кинетической энергии в стационарном состоянии ψ_n (волновая функция предполагается вещественной)

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \int \psi_n \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} dx = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \left(\frac{d\psi_n}{dx}\right)^2 dx.$$

В квазиклассическом приближении в классически доступной области ($a < x < b$) волновая функция имеет вид

$$\psi_n = \frac{A_n}{\sqrt{Vp}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right), \quad p = \sqrt{2\mu(E_n - V)},$$

откуда

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_n}{dx} = & -\frac{\sqrt{p}}{\hbar} A_n \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right) - \\ & - \frac{1}{2} \frac{A_n}{p^{3/2}} \frac{dp}{dx} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned}$$

При подстановке этого выражения в интеграл, определяющий \bar{T} , пределы интегрирования можно ограничить классически доступной областью, так как вне этой области ψ_n экспоненциально убывает. Заменяя квадраты сильно осциллирующих тригонометрических функций на их среднее значение $\frac{1}{2}$ и пренебрегая интегралом, содержащим осцилли-

$$\begin{aligned} \text{рующий множитель } & \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right) \cdot \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right) = \\ = & \frac{1}{2} \sin \left(\frac{2}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{2} \right), \text{ получаем:} \end{aligned}$$

$$\bar{T} = \frac{A_n^2}{4\mu} \int_a^b \left[p + \frac{\hbar^2}{4p^3} \left(\frac{dp}{dx} \right)^2 \right] dx.$$

Условие применимости квазиклассического приближения $\left| \frac{d\lambda}{dx} \right| = \frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| \ll 1$ означает, что второй член под знаком интеграла мал по сравнению с первым, поэтому, воспользовавшись условием квантования, находим:

$$\bar{T} = \frac{A_n^2}{4\mu} \int_a^b p dx = \frac{A_n^2}{4\mu} \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Постоянная A_n определяется из условия нормировки

$$\int \psi_n^2 dx \approx A_n^2 \int_a^b \frac{1}{p} \cos^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{\pi}{4} \right) dx \approx \frac{A_n^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{p} = 1.$$

С другой стороны, дифференцируя условие квантования

$$\int_a^b p dx = \int_a^b \sqrt{2\mu(E_n - V_0)} dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

по n , получаем:

$$\mu \frac{dE_n}{dn} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_n - V)}} = \mu \frac{dE_n}{dn} \int_a^b \frac{dx}{p} = \pi\hbar,$$

откуда

$$A_n^2 = \frac{2\mu}{\pi\hbar} \frac{dE_n}{dn}.$$

Выражение для средней кинетической энергии после подстановки последнего равенства принимает вид

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \frac{dE_n}{dn} \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

20. а) $\bar{T} = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right);$

б) $\bar{T} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} \left[\sqrt{\frac{2\mu a^2 V_0}{\pi^2 \hbar^2}} + \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \left(n + \frac{1}{2} \right).$

21. Из теоремы вириала следует:

$$2\bar{T} = \bar{V},$$

откуда

$$E = \frac{2 + \nu}{\nu} \bar{T}.$$

Подставляя в это соотношение значение средней кинетической энергии

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \frac{dE_n}{dn} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

(см. предыдущую задачу), получаем уравнение

$$E = \frac{2 + \nu}{2\nu} \frac{dE}{dn} \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

решение которого имеет вид

$$E = \text{const} \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2\nu}{2+\nu}}$$

22. В качестве исходного уравнения возьмем условие квантования Бора

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

определяющее спектр, точнее $n(E)$, если задана потенциальная энергия $V(x)$. Поскольку по условию $V(x)$ — четная функция

$$2 \int_0^a \sqrt{2\mu [E - V(x)]} dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (1)$$

где $x_2 = -x_1 = a$, $E = V(a)$.

Задача, таким образом, сводится к отысканию решения интегрального уравнения (1), которое имеет вид *)

$$x(V) = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}} \int_{E_0}^V \frac{dE}{\sqrt{V-E}},$$

где $x(V)$ — функция, обратная $V(x)$, а $\frac{dE}{dn}$ рассматривается как функция E ; E_0 — начало отсчета энергии.

§ 2. ПРОХОЖДЕНИЕ ЧЕРЕЗ БАРЬЕР

1. В области металла ($x < 0$) общий вид волновой функции принадлежащей собственному значению E , следующий:

$$\psi_I = be^{ixx} + ce^{-ixx}, \quad x = \frac{\sqrt{2\mu(E + V_0)}}{\hbar}.$$

*) Настоящая задача тесно связана со следующей задачей классической механики: дан период колебаний как функция энергии частицы, требуется найти потенциальную энергию (см. Ландау и Пятагорский, «Механика», Гостехиздат, 1940, где дано решение этой задачи)

В области $x > 0$ собственная функция имеет вид волны, бегущей из металла

$$\psi_{II} = ae^{ikx}, \quad \text{где} \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}.$$

На границе металла волновые функции ψ_I и ψ_{II} и их производные должны удовлетворять условию непрерывности

$$\psi_{II}(0) = \psi_I(0), \quad a = b + c,$$

$$\psi'_{II}(0) = \psi'_I(0), \quad ak = (b - c)x.$$

Отношение плотности потока отраженной волны к плотности потока падающей дает коэффициент отражения

$$R_0 = \left(\frac{x - k}{x + k} \right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E + V_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E + V_0} + \sqrt{E}} \right)^2 = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E + V_0} + \sqrt{E})^4}.$$

Если энергия электрона $E = 0$, коэффициент отражения $R_0 = 1$ с возрастанием энергии R_0 быстро уменьшается, при $E \gg V_0$

$$R_0 \approx \frac{V_0^2}{16E^2}.$$

В другом предельном случае $E \ll V_0$

$$R_0 \approx 1 - 4\sqrt{\frac{E}{V_0}}.$$

Для нормальных металлов $V_0 \sim 10$ эв. При этом коэффициент отражения для электронов с энергией $E = 0,1$ эв

$$R_0 = 0,67.$$

2. В уравнении Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi'' - \left(E + \frac{V_0}{e^{\frac{x}{a}} + 1} \right) \psi = 0 \quad (1)$$

произведем подстановку

$$\xi = -e^{-\frac{x}{a}}, \quad \psi = \xi^{-ika} u(\xi), \quad \text{где} \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}.$$

Для функции $u(\xi)$ получим гипергеометрическое уравнение

$$\xi(1-\xi)u'' + (1-2ika)(1-\xi)u' - \kappa_0^2 a^2 u = 0 \quad \left(\kappa_0 = \frac{\sqrt{2\mu V_0}}{\hbar}\right).$$

Решение уравнения (1), которое при $x \rightarrow \infty$ ($\xi \rightarrow 0$) является конечным и асимптотически представляет бегущую волну ce^{ikx} , имеет вид

$$\psi = ce^{ikx} F \left\{ i(x-k)a, -i(x+k)a, 1-2ika, -e^{-\frac{x}{a}} \right\} \\ \left(x = \frac{\sqrt{2\mu(E+V_0)}}{\hbar} \right).$$

Для того чтобы найти коэффициент отражения, необходимо определить вид волновой функции внутри металла ($x \rightarrow -\infty$):

$$\psi \approx c \frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(-2ika)}{\Gamma(-i(x+k)a)\Gamma(1-i(k+\kappa)a)} e^{ixx} + \\ + c \frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(2ika)}{\Gamma(i(x-k)a)\Gamma(1+i(x-k)a)} e^{-ixx}.$$

Отсюда находим коэффициент отражения

$$R_a = \left| \frac{\Gamma(2ika)\Gamma(-i(x+k)a)\Gamma(1-i(x+k)a)}{\Gamma(-2ika)\Gamma(i(x-k)a)\Gamma(1+i(x-k)a)} \right|^2 = \frac{\text{sh}^2 \pi a(x-k)}{\text{sh}^2 \pi a(x+k)}.$$

При вычислении R_a надо воспользоваться следующими соотношениями:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z),$$

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z},$$

$$\Gamma^*(ix) = \Gamma(-ix).$$

(x — действительное число). При $a \rightarrow 0$ формула для коэффициента отражения переходит в выражение для R_0 в случае прямоугольной потенциальной стенки (см. предыдущую задачу).

Легко убедиться, что имеет место неравенство $R_a < R_0$, т. е. коэффициент отражения в случае плавного изменения потенциала меньше, чем в случае скачкообразного изменения. Для $a = 1 \text{ \AA}$, $V_0 = 10 \text{ эв}$, $E = 0,1 \text{ эв}$ находим $R_a = 0,235$.

3. Рассмотрим поток частиц с энергией $E < V_0$, движущихся слева направо. В области III волновая функция представляет собой прошедшую волну

$$\psi_{III} = C e^{ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}.$$

В области I имеется как падающая, так и отраженная волны

$$\psi_I = e^{ikx} + A e^{-ikx}.$$

В области II общее решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi_{II}'' - (E - V_0) \psi_{II} = 0$$

имеет вид

$$\psi_{II} = B_1 e^{\alpha x} + B_2 e^{-\alpha x}, \quad \alpha = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

Коэффициенты A , B_1 , B_2 , C определяются из условий непрерывности волновой функции и ее первой производной.

В точке $x = 0$ эти условия приводят к соотношениям:

$$\begin{aligned} 1 + A &= B_1 + B_2 \\ ik(1 - A) &= \alpha(B_1 - B_2). \end{aligned}$$

Соответственно в точке $x = a$ имеем:

$$\begin{aligned} B_1 e^{\alpha a} + B_2 e^{-\alpha a} &= C e^{ika}, \\ \alpha(B_1 e^{\alpha a} - B_2 e^{-\alpha a}) &= ik C e^{ika}. \end{aligned}$$

Из этих уравнений находим:

$$\begin{aligned} A &= C \frac{k^2 + \alpha^2}{4ik\alpha} e^{ika} (e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}) = C \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \frac{e^{\alpha a} - e^{-\alpha a}}{4ik\alpha} e^{ika}, \\ B_1 &= C \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \frac{ik}{\alpha} \right) e^{ika - \alpha a}, \\ B_2 &= C \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \frac{ik}{\alpha} \right) e^{ika + \alpha a}, \\ C &= \frac{4ik}{\alpha} \frac{e^{-ika}}{e^{\alpha a} \left(1 - \frac{ik}{\alpha} \right)^2 - e^{-\alpha a} \left(1 + \frac{ik}{\alpha} \right)^2}. \end{aligned}$$

Поскольку принятое выражение для падающей волны в ψ_I имело вид e^{ikx} , коэффициент прохождения

$$D = CC^*.$$

Вычисление дает:

$$D = \frac{4k^2\chi^2}{(k^2 + \chi^2)^2 \operatorname{sh}^2 \chi a + 4k^2\chi^2}.$$

Отметим, что коэффициент прохождения стремится к нулю при переходе к классической механике, т. е. при $\hbar \rightarrow 0$.

Если $\chi a \gg 1$ (т. е. $(V_0 - E) \gg \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}$), то выражение для коэффициента прохождения принимает более простой вид

$$D \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-\frac{2\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar} a}.$$

Рассмотрим два конкретных примера:

а) Электрон с $E = 1$ эв проходит через потенциальный барьер $V_0 = 2$ эв и $a = 1$ Å. Для D получаем значение 0,777.

б) Пусть теперь на тот же потенциальный барьер падает протон с той же энергией. В этом случае оказывается, что коэффициент прохождения делается исчезающе малым $D = 3,6 \cdot 10^{-19}$.

4.

$$R = \frac{(k^2 - \chi^2) \sin^2 \chi a}{4k^2\chi^2 + (k^2 - \chi^2) \sin^2 \chi a} \quad \left(k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad \chi = \frac{\sqrt{2\mu(E - V_0)}}{\hbar}\right).$$

5. Для случая $E < V_0$ волновая функция может быть получена из выражения для волновых функций задачи 11 § 1 изменением знака у E и V_0 .

Общий вид волновой функции, относящейся к энергии E

$$\begin{aligned} \psi = c_1 \left(\operatorname{ch} \frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} F\left(-\lambda + \frac{i k a}{2}, -\lambda - \frac{i k a}{2}, \frac{1}{2}; -\operatorname{sh}^2 \frac{x}{a}\right) + \\ + c_2 \left(\operatorname{ch} \frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} \operatorname{sh} \frac{x}{a} F\left(-\lambda + \frac{i k a}{2} + \frac{1}{2}, \right. \\ \left. -\lambda + \frac{i k a}{2} + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -\operatorname{sh}^2 \frac{x}{a}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$\lambda = \frac{1}{4} \left(\sqrt{1 - \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} - 1 \right), \quad k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}.$$

Коэффициенты c_1 и c_2 определяются из того условия, что при $x \rightarrow +\infty$ волновая функция имеет асимптотический вид

$$\psi \sim e^{i k x}.$$

Для нахождения асимптотического вида (1) воспользуемся соотношением

$$F(\alpha, \beta, \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\beta - \alpha)}{\Gamma(\beta) \Gamma(\gamma - 1)} (-z)^{-\alpha} F\left(\alpha, \alpha + 1 - \gamma, \alpha + 1 - \beta; \frac{1}{z}\right) + \\ + \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha - \beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} (-z)^{-\beta} F\left(\beta, \beta + 1 - \gamma, \beta + 1 - \alpha; \frac{1}{z}\right).$$

Отсюда находим:

$$\psi_{x \rightarrow -\infty} \sim (-1)^{2\lambda} \left\{ (c_1 A_1 - c_2 A_2) \left(-\frac{1}{2}\right)^{-ika} e^{ikx} + \right. \\ \left. + (c_1 B_1 - c_2 B_2) \left(-\frac{1}{2}\right)^{ika} e^{-ikx} \right\}, \quad (2)$$

$$\psi_{x \rightarrow +\infty} \sim \left\{ (c_1 A_1 + c_2 A_2) \left(\frac{1}{2}\right)^{-ika} e^{-ikx} + \right. \\ \left. + (c_1 B_1 + c_2 B_2) \left(\frac{1}{2}\right)^{ika} e^{ikx} \right\}, \quad (3)$$

где для удобства введены обозначения

$$A_1 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(-ika)}{\Gamma\left(-\lambda - \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2} - \frac{ika}{2}\right)},$$

$$A_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma(-ika)}{\Gamma\left(-\lambda + \frac{1}{2} - \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(\lambda + 1 - \frac{ika}{2}\right)},$$

$$B_1 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(ika)}{\Gamma\left(-\lambda + \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(\lambda + \frac{1}{2} + \frac{ika}{2}\right)},$$

$$B_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma(ika)}{\Gamma\left(-\lambda + \frac{1}{2} + \frac{ika}{2}\right) \Gamma\left(\lambda + 1 + \frac{ika}{2}\right)}.$$

Различие в знаке перед коэффициентом c_2 в выражениях (2) и (3) объясняется тем, что $\operatorname{sh} \frac{x}{a}$ функция нечетная и второй член выражения (1) меняет знак при переходе от положительных к отрицательным значениям x .

Требование того, чтобы на $+\infty$ была только прошедшая волна, приводит к следующей связи коэффициентов c_1 и c_2 :

$$c_1 A_1 + c_2 A_2 = 0.$$

При этом коэффициент прохождения будет иметь вид

$$D = \frac{|c_1 B_1 + c_2 B_2|^2}{|c_1 A_1 - c_2 A_2|^2}.$$

Подставляя в последнее выражение значения коэффициентов A_1 , A_2 , B_1 , B_2 и производя несложные преобразования, получим окончательно:

$$D = \frac{\text{sh}^2 \pi k a}{\text{sh}^2 \pi k a + \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{1 - \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}} \right)}, \quad \text{если} \quad \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} < 1$$

и

$$D = \frac{\text{sh}^2 \pi k a}{\text{sh}^2 \pi k a + \text{ch}^2 \left(\frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} - 1} \right)}, \quad \text{если} \quad \frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} > 1.$$

6. Потенциальная энергия электрона имеет вид, изображенный на рис. 10. Коэффициент прохождения

$$D \approx e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} V_{2\mu}(|E| - Fx) dx},$$

где точки $x=0$, $x=x_0 = \frac{|E|}{F}$ ограничивают область, недоступную частице согласно классической механике. Производя вычисление интеграла в экспоненте, находим:

$$D \approx e^{-\frac{4}{3} \frac{V_{2\mu}}{\hbar F} |E|^{3/2}}. \quad (1)$$

Для выяснения вопроса о границах применимости этого результата заметим, что квазиклассическое рассмотрение неприменимо вблизи классической точки поворота x_0 внутри области $x - x_0 \lesssim \left(\frac{\hbar}{2\mu F} \right)^{1/2}$. Формула (1) применима в том случае, если эта область меньше ширины барьера $x_0 = \frac{|E|}{F}$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu F} \right)^{1/2} \ll \frac{|E|}{F} \quad \text{или} \quad \frac{V_{2\mu}}{\hbar F} |E|^{3/2} \gg 1.$$

Таким образом, это требование эквивалентно требованию малости коэффициента прохождения $D \ll 1$.

Коэффициент прохождения D быстро убывает с ростом $|E|$ и растет с увеличением F (см. таблицу 1).

7. Суммарная потенциальная энергия

$$V = -Fx - \frac{e^2}{4x}.$$

Следует заметить, что это выражение при малых x (порядка атомного расстояния) становится непригодным. Однако для вычисления коэффициента прохождения точный ход потенциала вблизи этой области несущественен.

Коэффициент прохождения

$$\begin{aligned} D &\approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\mu \left(|E| - Fx - \frac{e^2}{4x} \right)} dx \right\} = \\ &= \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p dx \right\}. \end{aligned}$$

Причем точки поворота x_1 и x_2 определяются из условия обращения в нуль классического импульса частицы

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2\mu \left(|E| - Fx - \frac{e^2}{4x} \right)} = 0, \\ x_{1,2} &= \frac{|E| \pm \sqrt{E^2 - e^2 F}}{2F}; \end{aligned}$$

интеграл

$$\int_{x_1}^{x_2} p dx = \sqrt{2\mu} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{|E| - Fx - \frac{e^2}{4x}} dx$$

представляет собою полный эллиптический интеграл. Заменив независимой переменной $\frac{F}{|E|} x = \xi$ интеграл сводится к функции одного параметра

$$\int_{x_1}^{x_2} p dx = \frac{2}{3} \sqrt{2\mu} \frac{|E|^{3/2}}{F} \varphi(y), \quad y = \frac{\sqrt{e^2 F}}{|E|}.$$

Таблица 1

Коэффициент прохождения

| F | 10^6 | $5 \cdot 10^6$ | 10^7 | $2 \cdot 10^7$ | $3 \cdot 10^7$ | $5 \cdot 10^7$ | $10^8 \frac{e}{c.M}$ |
|-------------------------------------|-------------|----------------------|----------------------|----------------------|---------------------|---------------------|----------------------|
| Без силы электрического изображения | | | | | | | |
| $E = 2 e$ | 10^{-84} | $1,3 \cdot 10^{-17}$ | $3,5 \cdot 10^{-9}$ | $6 \cdot 10^{-6}$ | $1,5 \cdot 10^{-3}$ | 0,02 | 0,14 |
| $E = 3 e$ | 10^{-154} | $1,3 \cdot 10^{-31}$ | $3,5 \cdot 10^{-16}$ | $19 \cdot 10^{-8}$ | $7 \cdot 10^{-6}$ | $8 \cdot 10^{-4}$ | 0,029 |
| $E = 5 e$ | 10^{-332} | $4 \cdot 10^{-67}$ | $6 \cdot 10^{-34}$ | $2,5 \cdot 10^{-17}$ | 10^{-11} | $2,5 \cdot 10^{-7}$ | $5 \cdot 10^{-4}$ |
| С силой электрического изображения | | | | | | | |
| $E = 2 e$ | 10^{-80} | $8 \cdot 10^{-15}$ | $1,3 \cdot 10^{-6}$ | 0,013 | 1 *) | 1 | 1 |
| $E = 3 e$ | 10^{-150} | $5 \cdot 10^{-28}$ | $7 \cdot 10^{-14}$ | $2,3 \cdot 10^{-6}$ | $7 \cdot 10^{-4}$ | 0,07 | 1 |
| $E = 5 e$ | 10^{-328} | $8 \cdot 10^{-65}$ | 10^{-31} | $2 \cdot 10^{-15}$ | $6 \cdot 10^{-10}$ | 10^{-5} | 0,01 |

*) Равенство единице коэффициента прохождения означает, что выход электрона допускается классической механикой.

Здесь $\varphi(y) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \sqrt{1 - \frac{y^2}{\xi} - \xi} d\xi$, пределы интегрирования ξ_1, ξ_2

определяются из условия обращения в нуль подкоренного выражения. Вводя обозначение $k_0 = \frac{4}{3} \sqrt{2\mu} \frac{|E|^{3/2}}{F}$, получим $D = e^{-k_0 \varphi(y)}$.

Отметим, что коэффициент прохождения без учета электрического изображения ($y=0$) $D = e^{-k_0}$ (см. задачу 6). Значения $\varphi(y)$ приведены в таблице 2. Влияние силы электрического изображения на коэффициент прохождения через потенциальный барьер можно уяснить из данных таблицы 1

Таблица 2

| y | 0 | 0,2 | 0,3 | 0,4 | 0,5 | 0,6 | 0,7 | 0,8 | 0,9 | 1,0 |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| $\varphi(y)$ | 1,000 | 0,951 | 0,904 | 0,849 | 0,781 | 0,696 | 0,603 | 0,494 | 0,345 | 0,000 |

8. Волновая функция имеет следующий вид:

$$\psi_I = A \sin kx \quad 0 < x < a,$$

$$\psi_{II} = B_1 e^x + B_2 e^{-x}, \quad a < x < a + b,$$

$$\psi_{III} = C \sin k(2a + b - x), \quad a + b < x < 2a + b,$$

здесь

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

Условия непрерывности волновой функции и ее производной приводят к следующим соотношениям:

$$A \sin ka = B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a},$$

$$Ak \cos ka = \kappa (B_1 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a}),$$

$$B_1 e^{\kappa(a+b)} + B_2 e^{-\kappa(a+b)} = C \sin ka,$$

$$\kappa (B_1 e^{\kappa(a+b)} - B_2 e^{-\kappa(a+b)}) = -Ck \cos ka.$$

Исключая из этих уравнений B_1 и B_2 , находим:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) A e^{\chi b} &= \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) C, \\ \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) A e^{-\chi b} &= \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) C. \end{aligned}$$

Из условия обращения в нуль детерминанта

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) e^{\chi b} & - \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) \\ \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) e^{-\chi b} & - \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) \end{vmatrix} = 0$$

получаем:

$$\left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) e^{\chi b} = \pm \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right).$$

Это уравнение определяет уровни энергии.

Воспользовавшись неравенством

$$\chi b \gg 1,$$

последнее уравнение можно приближенно представить в следующем виде:

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\chi} \mp 2 \frac{k}{\chi} e^{-\chi b}.$$

Правая часть равенства представляет собою малую величину. В нулевом приближении получаем ($k \ll \chi$):

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}$$

— значения энергии для частицы в потенциальном ящике (см. задачу 1 § 1). В следующем приближении

$$\begin{aligned} k &= \frac{n\pi}{a} - \frac{k_0}{a\chi_0} \mp 2 \frac{k_0}{a\chi_0} e^{-\chi_0 b} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \\ E_n &= E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\chi_0} \mp 4 \frac{E_n^{(0)}}{a\chi_0} e^{-\chi_0 b}, \quad \chi_0 = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E_n^{(0)})}}{\hbar}. \end{aligned}$$

Первые два члена $E_n^{(1)} = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\chi_0}$ не зависят от b и дают приближенные значения уровней энергии для частицы в потенциальной яме, изображенной на рис. 20 ($b \rightarrow \infty$).

В этом приближении уровни двукратно вырождены; это соответствует возможности нахождения частицы как в области *I*, так и в области *III*. Учет конечности *b*, т. е.

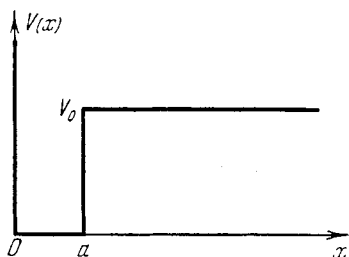


Рис. 20.

возможности прохождения частицы через потенциальный барьер, приводит к расщеплению уровней. Это расщепление экспоненциально мало. Найдем в рассматриваемом приближении коэффициенты *A*, *B*₁, *B*₂ и *C*. Нижнему уровню

$$E_n^- = E_n^{(1)} - 4 \frac{E_n^{(0)}}{ax_0} e^{-x_0 b}$$

соответствуют такие коэффициенты

$$B_1 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{x_0} e^{-x_0(b+a)} A,$$

$$C = A,$$

$$B_2 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{x_0} e^{x_0 a} A.$$

Верхнему уровню

$$E_n^+ = E_n^{(1)} + 4 \frac{E_n^{(0)}}{ax_0} e^{-x_0 b}$$

соответствуют коэффициенты

$$B_1 = -(-1)^{n-1} \frac{k_0}{x_0} e^{-x_0(a+b)} A,$$

$$C = -A,$$

$$B_2 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{x_0} e^{x_0 a} A.$$

Значение *A*, определяемое из условия нормировки, равно $\frac{1}{\sqrt{a}}$ (при вычислении нормировочного интеграла долей, внесимой областью *II*, можно пренебречь).

Таким образом, нижнему уровню соответствует волновая функция

$$\psi_I = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx,$$

$$\psi_{II} = (-1)^{n-1} \frac{1}{\sqrt{a} x_0} \left\{ e^{-x_0(x-a)} + e^{-x_0(a+b-x)} \right\},$$

$$\psi_{III} = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin k(2a + b - x).$$

Соответственно для верхнего уровня находим:

$$\psi_I = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx,$$

$$\psi_{II} = (-1)^{n-1} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{k_0}{x_0} \{ e^{-x_0(x-a)} - e^{-x_0(a+b-x)} \},$$

$$\psi_{III} = -\frac{1}{\sqrt{a}} \sin k(2a+b-x).$$

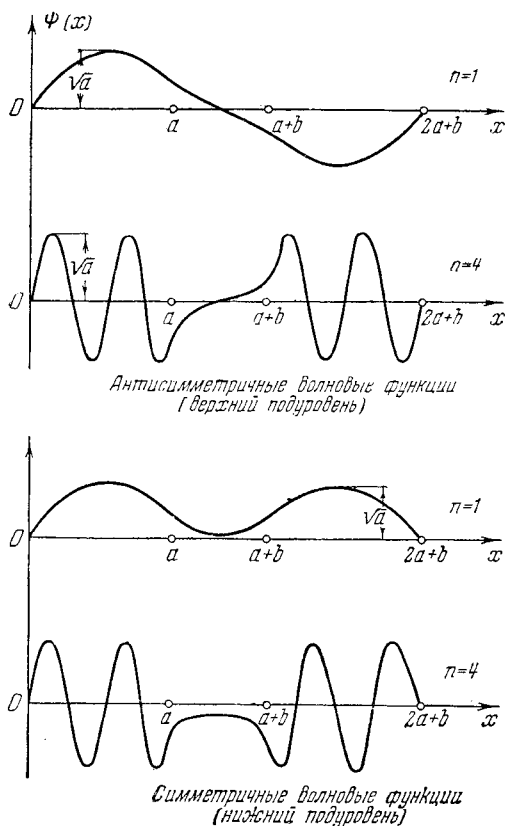


Рис. 21.

На рис. 21 приведены графики волновых функций для $n = 1$ и $n = 4$.

9. Для волновой функции в области $x < -b$ имеем:

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{-b} |p| dx}$$

(решение на бесконечности должно обращаться в нуль).

В области $b < x < -a$

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{c}{\sqrt{p}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-b}^x p dx} + \frac{c}{\sqrt{p}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-b}^x p dx} = \\ &= \frac{c}{\sqrt{p}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{-a} p dx} + \\ &+ \frac{c}{\sqrt{p}} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{-a} p dx} . \end{aligned}$$

В области $-a < x < +a$

$$\begin{aligned} \psi &= ce^{-i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx} \left\{ \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x |p| dx} + \right. \\ &+ \left. \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x |p| dx} \right\} + \\ &+ ce^{i\frac{\pi}{4}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx} \left\{ \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x |p| dx} + \right. \\ &+ \left. \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x |p| dx} \right\} = \\ &= \frac{c}{\sqrt{|p|}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^{+a} |p| dx} + \end{aligned}$$

$$+ \frac{2c}{\sqrt{|p|}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx \right) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{+a} |p| dx}.$$

Для $+a < x < +b$ получаем аналогично:

$$\begin{aligned} \psi &= c \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} \times \\ &\times \left\{ \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{+a}^x p dx} + \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{2\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{+a}^x p dx} \right\} + \\ &+ 2c \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx \right) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} \times \\ &\times \left\{ \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{+a}^x p dx} + \frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx} \right\} = \\ &= \frac{c}{\sqrt{p}} \left\{ \frac{1}{2} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx - i\frac{\pi}{4}} + \right. \\ &+ 2 \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx \right) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx + i\frac{\pi}{4}} \left. \left\{ e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{+a}^{+b} p dx} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^{+b} p dx} + \right. \right. \\ &+ \frac{c}{\sqrt{p}} \left\{ \frac{1}{2} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{-a} p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx + i\frac{\pi}{4}} + \right. \\ &+ 2 \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx \right) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx - i\frac{\pi}{4}} \left. \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \int_{+a}^{+b} p dx} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^{+b} p dx} \right. \right. \end{aligned}$$

И, наконец, продолжая это решение в область $x > +b$, имеем:

$$\begin{aligned} \psi = & \frac{c}{\sqrt{|p|}} \left\{ \frac{1}{2} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} + \right. \\ & + 2 \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) \times \\ & \times e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} \left. \right\} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx} + \\ & + \frac{c}{\sqrt{|p|}} \left\{ -\sin^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} + \right. \\ & \left. + 4 \cos^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} \right\} e^{\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx}. \end{aligned}$$

Для того чтобы решение при $x \rightarrow +\infty$ стремилось к нулю, необходимо, чтобы коэффициент при $e^{\frac{1}{\hbar} \int_b^x |p| dx}$ обращался в нуль, т. е.

$$\begin{aligned} -\sin^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} + \\ + 4 \cos^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) e^{\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx} = 0, \end{aligned}$$

откуда

$$\operatorname{ctg} \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx \right) = \pm \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} |p| dx}.$$

Считая прозрачность барьера малой величиной, получаем условие для определения уровней энергии

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b p dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^+ |p| dx}.$$

Обозначим через $E_n^{(0)}$ уровни энергии отдельной потенциальной ямы

$$\frac{1}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2\mu(E_n^{(0)} - V)} dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Уровни энергии в двойной яме $E_n = E_n^{(0)} + \Delta E_n$ найдем из полученного условия квантования, разлагая $\sqrt{2\mu(E_n - V)}$ в ряд по ΔE_n и ограничиваясь линейным членом по ΔE_n

$$\Delta E_n \frac{\mu}{\hbar} \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_n^{(0)} - V)}} = \pm \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^+ |p| dx}$$

или

$$\Delta E_n = \pm \frac{\hbar\omega}{2\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^+ |p| dx},$$

где ω — циклическая частота классического движения в отдельной яме $\frac{2\pi}{\omega} = 2\mu \int_a^b \frac{dx}{p}$.

Расщепление уровня E_n равно $2|\Delta E_n|$.

$$10. \tau = \frac{\pi^2}{\omega} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^+ |p| dx}.$$

11. В области n -го потенциального барьера $b_n < x < a_{n+1}$ волновую функцию запишем в виде

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{C_n}{V|p|} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^x |p| dx} + \frac{D_n}{V|p|} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^x |p| dx} = \\ &= \frac{C_n}{V|p|} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^{a_{n+1}} |p| dx} + \\ &+ \frac{D_n}{V|p|} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{a_{n+1}} |p| dx} ; \end{aligned}$$

продолжая эту функцию в область $(n+1)$ -го потенциального барьера $b_{n+1} < x < a_{n+2}$, будем иметь:

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{V|p|} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx} \left\{ \frac{C_n}{2} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p dx\right) + \right. \\ &+ D_n e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p dx\right) \left. \right\} + \\ &+ \frac{1}{V|p|} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx} \left\{ -C_n e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx} \times \right. \\ &\times \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p dx\right) + 2D_n e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_n}^{a_{n+1}} |p| dx} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}} p dx\right) \left. \right\}. \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx = \frac{1}{\hbar} \int_{b_2}^{a_3} |p| dx = \dots = \frac{1}{\hbar} \int_{b_{N-1}}^{a_N} |p| dx = \tau,$$

$$\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_i} p dx = \frac{1}{\hbar} \int_{a_2}^{b_2} p dx = \dots = \frac{1}{\hbar} \int_{a_N}^{b_N} p dx = \sigma.$$

Тогда предыдущее выражение для ψ в области $(n+1)$ -го барьера преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \psi = & \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx} \left\{ \frac{C_n}{2} e^{-\tau} \cos \sigma + D_n e^{\tau} \sin \sigma \right\} + \\ & + \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx} \left\{ -C_n e^{-\tau} \sin \sigma + 2D_n e^{\tau} \cos \sigma \right\} = \\ & = \frac{C_{n+1}}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx} + \frac{D_{n+1}}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_{b_{n+1}}^x |p| dx}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} C_{n+1} &= \frac{C_n}{2} e^{-\tau} \cos \sigma + D_n e^{\tau} \sin \sigma, \\ D_{n+1} &= -C_n e^{-\tau} \sin \sigma + 2D_n e^{\tau} \cos \sigma. \end{aligned}$$

Связь коэффициентов C_{n+1} , D_{n+1} с C_n , D_n удобно представить в матричной форме

$$\begin{pmatrix} C_{n+1} \\ D_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-\tau} \cos \sigma & e^{\tau} \sin \sigma \\ -e^{-\tau} \sin \sigma & 2e^{\tau} \cos \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Применяя соотношение (1) последовательно N раз, получим связь между C_N , D_N и C_0 , D_0 :

$$\begin{pmatrix} C_N \\ D_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-\tau} \cos \sigma & e^{\tau} \sin \sigma \\ -e^{-\tau} \sin \sigma & 2e^{\tau} \cos \sigma \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix} = A^N \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix}.$$

Волновая функция стационарного состояния должна убывать как при $x < a_1$, так и при $x > b_N$, поэтому надо потребовать, чтобы $C_0 = D_N = 0$. Легко видеть, что для этого должен обратиться в нуль элемент $(A^N)_{22}$. Условие $(A^N)_{22} = 0$ определит энергетический спектр задачи. Чтобы вычислить этот матричный элемент, рассмотрим матрицу

$$S = e^{At} = 1 + tA + \frac{t^2}{2!} A^2 + \frac{t^3}{3!} A^3 + \dots + \frac{t^N}{N!} A^N + \dots$$

Как нетрудно убедиться непосредственно, матрица S удовлетворяет уравнению

$$\frac{dS}{dt} = AS \quad (2)$$

с начальным условием

$$S(0) = 1.$$

Запишем уравнение (2) более подробно

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{cases} \frac{dS_{11}}{dt} = \alpha S_{11} + \beta S_{21}, & \frac{dS_{12}}{dt} = \alpha S_{12} + \beta S_{22}, \\ \frac{dS_{21}}{dt} = \gamma S_{11} + \delta S_{21}, & \frac{dS_{22}}{dt} = \gamma S_{12} + \delta S_{22}. \end{cases}$$

Поскольку условие, определяющее спектр энергий, может быть записано в виде

$$(A^N)_{22} = \left(\frac{d^N S_{22}}{dt^N} \right)_{t=0} = 0,$$

достаточно рассмотреть вторую пару уравнений.

Полагая $S_{12} = fe^{\lambda t}$, $S_{22} = ge^{\lambda t}$, получаем:

$$f\lambda = \alpha f + \beta g,$$

$$g\lambda = \gamma f + \delta g.$$

Значения λ определяются из уравнения

$$\begin{vmatrix} \alpha - \lambda & \beta \\ \gamma & \delta - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad \lambda^2 - \lambda \left(2e^\tau + \frac{1}{2} e^{-\tau} \right) \cos \sigma + 1 = 0,$$

которое дает два корня λ_1 и λ_2 . Ввиду того, что $\lambda_1\lambda_2 = 1$, можно $\lambda_{1,2}$ представить в виде

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iu},$$

где

$$\cos u = \left(e^\tau + \frac{1}{4} e^{-\tau} \right) \cos \sigma.$$

Если $\lambda_1 \neq \lambda_2$, то решение, удовлетворяющее начальным условиям $S_{12}(0) = 0$, $S_{22}(0) = 1$, имеет вид

$$S_{12} = \beta (e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t}),$$

$$S_{22} = \frac{(\lambda_1 - \alpha) e^{\lambda_1 t} - (\lambda_2 - \alpha) e^{\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}.$$

Условие, определяющее энергетический спектр задачи, теперь запишется следующим образом:

$$(A^N)_{22} = \left(\frac{d^N S_{22}}{dt^N} \right)_{t=0} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \{ (\lambda_1 - \alpha) \lambda_1^N - (\lambda_2 - \alpha) \lambda_2^N \} = 0.$$

Подставим в это выражение значения

$$\lambda_{1,2} = e^{\pm iu}$$

и пренебрежем в формуле, определяющей $\cos u$, $e^{-\tau}$, что эквивалентно предположению о малой величине проницаемости:

$$\cos u \approx e^\tau \cos \sigma.$$

При этом предположении условие, определяющее уровни энергии, приобретает простой вид

$$\frac{\sin(N+1)u}{\sin u} = 0.$$

Это уравнение имеет следующие корни:

$$u = \frac{n\pi}{N+1},$$

за исключением $u = 0, \pi, 2\pi$.

При этом $\cos u$ имеет N различных значений

$$\cos u = \cos \frac{n\pi}{N+1} \approx e^\tau \cos \sigma \quad (n = 1, 2, \dots, N).$$

Более подробно

$$\cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} p dx\right) = e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx} \cos \frac{\pi n}{N+1} \quad (n = 1, 2, \dots, N).$$

Так как $e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx}$ малая величина, то последнее соотношение можно переписать в виде

$$\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} p dx = \pi \left(m + \frac{1}{2}\right) + e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx} \cos \frac{\pi n}{N+1} \quad (3)$$

$$(m = 0, 1, 2, \dots) \quad (n = 1, 2, \dots, N).$$

Это есть условие для определения энергетических уровней в поле $V(x)$. Оно очень похоже на условие квантования для поля отдельной ямы. Из рассмотрения (3) можно заключить, что энергетический спектр в поле $V(x)$ представляет собой, грубо говоря, энергетический спектр отдельной ямы, все уровни которого расщеплены на N подуровней. Определим величину смещения ΔE_m :

$$\frac{1}{\hbar} \int_{a_1}^{b_1} \sqrt{2\mu(E_m^{(0)} - V)} dx + \frac{2\mu}{2\hbar} \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_m^{(0)} - V)}} \Delta E_m =$$

$$= \pi \left(m + \frac{1}{2}\right) + e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx} \cos \frac{\pi n}{N+1} \quad (n = 1, 2, \dots, N),$$

откуда, вводя обозначение

$$\frac{\pi}{\omega} = \mu \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{p} = \mu \int_{a_1}^{b_1} \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_m^{(0)} - V)}},$$

получим:

$$\Delta E_m = \frac{\hbar\omega}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{b_1}^{a_2} |p| dx} \cos \frac{n\pi}{N+1} \quad (n = 1, 2, \dots, N).$$

Расстояние между верхним и нижним подуровнями равно

$$\frac{2\hbar\omega}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_b^a |p| dx} \cos \frac{\pi}{N+1}.$$

12. В области $x < -b$ по смыслу задачи имеется только уходящая в $-\infty$ волна, т. е.

$$\psi = \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_x^{-b} p dx\right).$$

Продолжая это решение в область $x > b$, получаем следующее выражение для волновой функции:

$$\begin{aligned} \psi = & \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx\right) \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{8} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx + i\frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx\right) + \right. \\ & \left. + 2 \exp\left(\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx - i\frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx\right) \right\} + \\ & + \frac{c}{\sqrt{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx\right) \left\{ \frac{1}{8} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right) \times \right. \\ & \times \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx\right) - i \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx\right) + \\ & \left. + 2 \exp\left(\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx\right) \right\}. \end{aligned}$$

Квазистационарные уровни определяются из условия отсутствия приходящей из $+\infty$ волны.

Приравнивая второй член в последнем выражении нулю, получаем:

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p \, dx \right) &= \\ &= i \left\{ \frac{1}{8} \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| \, dx \right) + 2 \exp \left(\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| \, dx \right) \right\}^{-1}. \end{aligned}$$

Считая $\exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| \, dx \right)$ малой величиной, найдем, что

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p \, dx = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{i}{2} \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| \, dx \right),$$

откуда следует условие для определения квазистационарных

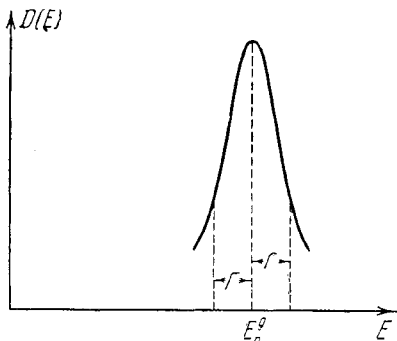


Рис. 22.

уровней $E_n^{(0)}$ и их ширины Γ .

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} \sqrt{2\mu(E_n^0 - V)} \, dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\frac{\hbar\omega}{2\pi} \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| \, dx \right) = \Gamma,$$

где

$$\omega = \pi \left(\mu \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2\mu(E_n^0 - V)}} \right)^{-1}.$$

Для коэффициента прохождения получаем следующее значение:

$$D(E) = \left\{ 4 \exp \left(\frac{4}{\hbar} \int_a^b |p| dx \right) \cos^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx \right) + \sin^2 \left(\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^{+a} p dx \right) \right\}^{-1}$$

При значении E , совпадающем с одним из квазиуровней, $D(E_n^0) = 1$. При $|\Delta E| < |E_n^0|$ имеем:

$$D(E_n^0 + \Delta E) = \frac{1^2}{\Gamma^2 + (\Delta E)^2}.$$

На рис. 22 изображено поведение $D(E)$ вблизи квазиуровня.

§ 3. ПЕРЕСТАНОВОЧНЫЕ СООТНОШЕНИЯ. СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ. РАСПЛЫВАНИЕ ПАКЕТОВ

1. Рассмотрим сначала случай дискретного набора волновых функций ψ_i . Средние значения операторов \hat{A} и \hat{B} в состоянии, характеризуемом функцией ψ ($\psi = \sum a_i \psi_i$), равны

$$\bar{A} = \sum_{i, k} a_i^* A_{ik} a_k,$$

$$\bar{B} = \sum_{i, k} a_i^* B_{ik} a_k.$$

Составим неотрицательную величину

$$J(\lambda) = \sum_i \left\{ \sum_k (A_{ik} + i\lambda B_{ik}) a_k \right\}^* \left\{ \sum_l (A_{il} + i\lambda B_{il}) a_l \right\} \geq 0$$

(здесь λ — действительный параметр).

Собирая члены с одинаковыми степенями λ и пользуясь эрмитовостью операторов \hat{A} и \hat{B} ($A_{ik} = A_{ki}^*$, $B_{ik} = B_{ki}^*$), находим:

$$J(\lambda) = \sum_{i, k, l} \left\{ a_k^* A_{ki} A_{il} a_l + i\lambda a_k^* (A_{ki} B_{il} - B_{ki} A_{il}) a_l + \right. \\ \left. + \lambda^2 a_k^* B_{ki} B_{il} a_l \right\} = \bar{A}^2 + \lambda \bar{C} + \lambda^2 \bar{B}^2.$$

Здесь \hat{C} — эрмитовский оператор

$$\hat{C} = \frac{1}{i} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}).$$

Квадратичная форма $J(\lambda)$ является неотрицательной и, таким образом, $4\overline{\hat{A}^2\hat{B}^2} \geq (\overline{\hat{C}})^2$. Замечая, что операторы $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \overline{\hat{A}}$ и $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \overline{\hat{B}}$ удовлетворяют тому же соотношению коммутации, что \hat{A} и \hat{B}

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} - \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} = i\hat{C},$$

получаем:

$$\sqrt{\overline{(\Delta\hat{A})^2} \overline{(\Delta\hat{B})^2}} \geq \frac{|\overline{\hat{C}}|}{2}.$$

Доказательство этого соотношения для непрерывного набора можно провести аналогичным способом. Выражение

$$J(\lambda) = \int \{(\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi\}^* \{(\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi\} d\tau,$$

где λ — действительное число, является неотрицательным и может быть преобразовано следующим образом:

$$\begin{aligned} J(\lambda) &= \int \{(\hat{A}\psi)^* - i\lambda(\hat{B}\psi)^*\} \{\hat{A}\psi + i\lambda\hat{B}\psi\} d\tau = \\ &= \int \{\psi^* \hat{A}^2 \psi + i\lambda \psi^* (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) \psi + \lambda^2 \psi^* \hat{B}^2 \psi\} d\tau. \end{aligned}$$

Действительно, в силу эрмитовости оператора \hat{A}

$$\int (\hat{A}\psi)^* \varphi d\tau = \int \psi^* \hat{A}\varphi d\tau.$$

Последующая часть доказательства проводится так же, как и ранее.

$$2. \quad \overline{(\Delta\hat{q})^2} \overline{(\Delta\hat{F})^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \left| \frac{\partial \overline{\hat{F}}}{\partial \overline{\hat{p}}} \right|^2.$$

3. Энергия осциллятора в стационарном состоянии

$$E = \int \psi(x) \left\{ \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{kx^2}{2} \right\} \psi(x) dx = \frac{\overline{\hat{p}^2}}{2\mu} + \frac{k\overline{\hat{x}^2}}{2};$$

так как

$$\begin{aligned} \overline{\hat{p}^2} &= \overline{(\hat{p} - \overline{\hat{p}})^2} + \overline{(\overline{\hat{p}})^2} = \overline{(\Delta\hat{p})^2} + \overline{(\overline{\hat{p}})^2}, \\ \overline{\hat{x}^2} &= \overline{(\Delta\hat{x})^2} + \overline{(\overline{\hat{x}})^2} \end{aligned}$$

и

$$\overline{\hat{p}} = 0 \quad \overline{\hat{x}} = 0,$$

то

$$E = \frac{(\overline{\Delta \hat{p}})^2}{2\mu} + \frac{k(\overline{\Delta \hat{x}})^2}{2}.$$

Из соотношения неопределенностей $(\overline{\Delta \hat{p}})^2 \cdot (\overline{\Delta \hat{x}})^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$ следует

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8\mu(\overline{\Delta \hat{x}})^2} + \frac{k(\overline{\Delta \hat{x}})^2}{2}.$$

Выражение в правой части принимает минимальное значение при

$$(\overline{\Delta \hat{x}})^2 = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{1}{\mu k}},$$

при этом

$$E_{\min} \sim \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{\hbar \omega}{2},$$

где $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ — частота осциллятора.

4. В рассматриваемом случае можно пренебречь экранированием поля ядра другими электронами.

Энергия K -электрона

$$E = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Поскольку $p \sim \frac{\hbar}{r}$, где r — размер области локализации

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (1)$$

Это выражение принимает минимальное значение при $r = \frac{\hbar^2}{Ze^2\mu} = \frac{a}{Z}$ ($a = 0,529 \cdot 10^{-8}$ см — радиус первой орбиты Бора).

При этом энергия

$$E \sim -\frac{Z^2 \mu e^4}{2 \hbar^2} = -Z^2 \cdot 13,5 \text{ эв.}$$

Если учесть релятивистские поправки на изменение массы, то выражение (1) примет вид

$$\begin{aligned} E &\geq \left\{ \mu_0^2 c^4 + c^2 p^2 \right\}^{1/2} - \frac{Ze^2}{r} - \mu_0 c^2 \geq \\ &\geq \left\{ \mu_0^2 c^4 + \frac{c^2 \hbar^2}{r^2} \right\}^{1/2} - \frac{Ze^2}{r} - \mu_0 c^2. \end{aligned}$$

Отсюда находим значение энергии

$$E \geq \mu_0 c^2 \left\{ (1 - \alpha^2 Z^2)^{1/2} - 1 \right\}, \quad \text{где } \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}.$$

5. Пусть размер области локализации первого и второго электрона r_1 и r_2 . Тогда импульсы электронов на основании соотношения неопределенностей соответственно равны

$$p_1 \sim \frac{\hbar}{r_1}, \quad p_2 \sim \frac{\hbar}{r_2},$$

так что кинетическая энергия порядка величины

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right).$$

Потенциальная энергия взаимодействия электронов с ядром заряда Z равна

$$-Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

и энергия взаимодействия электронов между собой порядка $\frac{e^2}{r_1 + r_2}$. Для того чтобы найти энергию основного состояния, найдем минимум полной энергии

$$E(r_1, r_2) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) - Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_1 + r_2}.$$

Минимум осуществляется при значениях

$$r_1 = r_2 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \frac{1}{Z - \frac{1}{4}}.$$

Таким образом, энергия основного состояния иона с двумя электронами и зарядом ядра Z равна

$$E \sim - \left(Z - \frac{1}{4} \right)^2 \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = -2 \left(Z - \frac{1}{4} \right)^2 Ry,$$

$$Ry = \frac{1}{2} \frac{\mu e^2}{\hbar^2} = 13,5 \text{ эв.}$$

Сравнение с опытными данными показывает хорошее согласие, если принять при этом во внимание чрезвычайную простоту расчета.

| | H ⁻ | He | Li ⁺ | Be ⁺⁺ | B ⁺⁺⁺ | C ⁺⁺⁺⁺ |
|------------------------|----------------|--------|-----------------|------------------|------------------|-------------------|
| $E_{\text{выч}}$ в Ry | -1,125 | -6,125 | -15,12 | -28,12 | -45,12 | -66,12 |
| $E_{\text{эксп}}$ в Ry | -1,05 | -5,807 | -14,56 | -27,31 | -44,06 | -64,8 |

6. Не могут.

7. p_0 — среднее значение импульса частицы.

8. Для доказательства воспользуемся операторным соотношением, которое справедливо, если гамильтониан не зависит явно от времени и нет магнитного поля

$$\hat{p} = \frac{i\mu}{\hbar} (\hat{H}r - r\hat{H}).$$

Среднее значение \hat{p} в состоянии ψ дискретного спектра

$$\bar{\hat{p}} = \frac{i\mu}{\hbar} \int \psi^* (\hat{H}r - r\hat{H}) \psi d\tau.$$

В силу самосопряженности \hat{H}

$$\bar{\hat{p}} = \frac{i\mu}{\hbar} \int \{ \hat{H}^* \psi^* \cdot r \psi - \psi^* r \hat{H} \psi \} d\tau.$$

Так как для стационарного состояния

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \hat{H}^*\psi^* = E\psi^*,$$

окончательно получим:

$$\bar{\hat{p}} = 0.$$

9. Волновая функция $\psi(x, t)$ свободной частицы определяется через $\psi(x, 0)$ следующим образом:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(p) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(px - \frac{p^2}{2\mu} t \right) \right\} dp,$$

где

$$\begin{aligned} a(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) e^{\frac{i(p_0-p)x}{\hbar}} dx. \end{aligned}$$

Функция $a(p)$ заметно отличается от нуля только при тех значениях p , для которых выполнено соотношение

$$\frac{|p_0 - p|}{\hbar} \delta \leq 1.$$

Так как при выполнении этого соотношения осциллирующий множитель $e^{\frac{i(p_0 - p)x}{\hbar}}$ мало изменяется при изменении x в области

$$-\delta < x < +\delta,$$

то $\psi(x, t)$ можно приближенно представить в виде

$$\psi(x, t) \approx \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{p_0 - \frac{\hbar}{\delta}}^{p_0 + \frac{\hbar}{\delta}} a(p) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2\mu}t\right)\right\} dp$$

или

$$\psi(x, t) \approx \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(p_0x - \frac{p_0^2}{2\mu}t\right)\right\}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\frac{\hbar}{\delta}}^{+\frac{\hbar}{\delta}} a(p + p_0) \times \\ \times \exp\left\{+\frac{i}{\hbar}\left[p\left(x - \frac{p_0}{\mu}t\right) - \frac{p^2}{2\mu}t\right]\right\} dp.$$

Из последнего соотношения следует, что волновая функция $\psi(x, t)$ будет заметно отлична от нуля лишь тогда, когда осциллирующий множитель $\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[p\left(x - \frac{p_0}{\mu}t\right) - \frac{p^2}{2\mu}t\right]\right\}$ мало изменяется при изменении p в пределах $-\frac{\hbar}{\delta} < p < +\frac{\hbar}{\delta}$. Следовательно, размер волнового пакета в момент t по порядку равен

$$\delta_t \sim \delta + \frac{\hbar t}{2\mu\delta}.$$

10. Для решения задачи необходимо определить волновую функцию $\psi(x, t)$, удовлетворяющую уравнению Шредингера

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

и при $t=0$ принимающую заданное значение $\psi(x, 0)$. Если \hat{H} не зависит явно от времени, уравнение (1) имеет решения

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}, \quad (2)$$

где $\psi_n(x)$ — не зависящие от времени собственные функции оператора \hat{H}

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x).$$

Найдем коэффициенты разложения $\psi(x, 0)$ по системе функции $\psi_n(x)$,

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n \psi_n(x), \quad a_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x, 0) dx.$$

Функция $\sum_n a_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$ удовлетворяет уравнению (1) и при $t=0$ совпадает с $\psi(x, 0)$.

Таким образом,

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

или

$$\psi(x, t) = \int G_t(\xi, x) \psi(\xi, 0) d\xi, \quad (3)$$

причем

$$G_t(\xi, x) = \sum_n \psi_n^*(\xi) \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}.$$

Итак, для решения поставленной задачи достаточно вычислить функцию Грина $G_t(\xi, x)$ и воспользоваться уравнением (3).

а) В случае свободного движения собственные функции

$$\psi_p(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i \frac{pr}{\hbar}}, \quad E_p = \frac{p^2}{2\mu}$$

и соответствующая функция Грина

$$\begin{aligned} G_t(p, r) &= \int \int \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[p(r - \rho) - \frac{p^2 t}{2\mu} \right] \right\} = \\ &= \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar t} \right)^{3/2} e^{\frac{i\mu}{2\hbar t} (r-\rho)^2}. \end{aligned}$$

Поскольку в соответствии с условиями задачи

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \exp\left\{\frac{i\mathbf{p}_0\mathbf{r}}{\hbar} - \frac{r^2}{2\delta^2}\right\}$$

имеем:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = & \int \int \int \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar t}\right)^{3/2} \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4}} \times \\ & \times \exp\left\{-\frac{\rho^2}{2\delta^2} + \frac{i\mathbf{p}_0\rho}{\hbar} + \frac{i\mu}{2\hbar t}(\mathbf{r} - \rho)^2\right\} d\rho, \end{aligned}$$

откуда находим:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{(\pi\delta^2)^{3/4} \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4}\right)^{3/4}} \times \\ & \times \exp\left\{-\frac{\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}_0 t}{\mu}\right)^2}{2\delta^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4}\right)} \left(1 - \frac{\hbar t}{\mu\delta^2}\right) - \frac{i\mathbf{p}_0^2 t}{2\mu\hbar} + \frac{i\mathbf{p}_0\mathbf{r}}{\hbar}\right\}, \end{aligned}$$

для плотности вероятности получаем:

$$\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\left[\pi\delta^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4}\right)\right]^{3/2}} \exp\left\{-\frac{\left(\mathbf{r} - \frac{\mathbf{p}_0 t}{\mu}\right)^2}{\delta^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4}\right)}\right\}.$$

Из этого выражения видно, что центр тяжести пакета движется со скоростью $\frac{\mathbf{p}_0}{\mu}$. Размер пакета δ_t , вначале равный по порядку величины δ , увеличивается с течением времени по закону

$$\delta_t = \delta \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4}},$$

но вид распределения по r остается по-прежнему гауссовским. Оценим время τ , в течение которого размеры пакета изменяются на величину порядка первоначального размера пакета

$$\tau \sim \frac{\delta^2 \mu}{\hbar}.$$

При $t \gg \tau$ линейные размеры пакета увеличиваются пропорционально времени

$$\delta_t \sim \frac{\hbar}{\mu \delta} t.$$

Рассмотрим несколько конкретных примеров.

Для электрона, локализованного вначале в области $\delta \sim 10^{-8}$ см τ имеет порядок 10^{-16} сек. Для «классической» частицы $\mu = 1$ г $\delta = 10^{-5}$ см находим $\tau = 10^{17}$ сек $\sim \sim 3$ млрд. лет.

б) Волновые функции при одномерном движении частицы в однородном поле $V = -Fx$ имеют вид (см. задачу 13 § 1)

$$\psi_E(x) = A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left(\frac{u^3}{3} - uq\right)} du, \quad q = \left(x + \frac{E}{F}\right) \alpha,$$

где

$$\alpha = \left(\frac{2\mu F}{\hbar^2}\right)^{1/2}, \quad A = \frac{\alpha}{2\pi \sqrt{F}}.$$

Вычислим функцию Грина

$$\begin{aligned} G_t(\xi, x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \psi_E^*(\xi) \psi_E(x) = \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} du dv e^{-i\left(\frac{v^3}{3} - v\eta\right) + i\left(\frac{u^3}{3} - uq\right)}, \end{aligned}$$

где

$$\eta = \left(\xi + \frac{E}{F}\right) \alpha.$$

Произведем сначала интегрирование по E

$$\begin{aligned} G_t(\xi, x) &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} du dv e^{-i\frac{v^3}{3} + i\frac{u^3}{3} + iv\xi\alpha - iux\alpha} \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-i\frac{E\alpha}{F}\left(u + \frac{Ft}{\alpha\hbar} - v\right)} = \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} du dv e^{-i\frac{v^3}{3} + i\frac{u^3}{3} + iv\xi\alpha - iux\alpha} \cdot \frac{2\pi F}{\alpha} \delta\left(u + \frac{Ft}{\alpha\hbar} - v\right). \end{aligned}$$

Воспользовавшись свойствами δ -функции, произведем интегрирование по v и приведем выражение в экспоненте к виду, удобному для последующего интегрирования по u :

$$G_t(\xi, x) = \frac{2\pi F}{\alpha} A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} du \exp \left\{ -i \frac{Ft}{\alpha \hbar} \times \right. \\ \left. \times \left[u + \frac{Ft}{2\alpha \hbar} + \frac{\alpha^2 \hbar}{2Ft} (x - \xi) \right]^2 - \frac{l}{12} \left(\frac{Ft}{\alpha \hbar} \right)^3 + \right. \\ \left. + \frac{l}{2} \frac{Ft}{\hbar} (x + \xi) + \frac{i\alpha^3 \hbar}{4Ft} (x - \xi)^2 \right\}.$$

Окончательно для функции Грина получаем:

$$G_t(\xi, x) = \left(\frac{\mu}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{l}{12} \left(\frac{Ft}{\hbar \alpha} \right)^3 + \right. \\ \left. + \frac{lFt}{2\hbar} (x + \xi) + \frac{i\mu}{2\hbar t} (x - \xi)^2 \right\}.$$

При $F \rightarrow 0$, как и следовало ожидать, это выражение переходит в функцию Грина для свободного одномерного движения. С помощью выражения (3) можно определить изменение во времени волновой функции, заданной при $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi \delta^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2\delta^2} + \frac{ip_0 x}{\hbar}}.$$

В результате вычислений получаем:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\left\{ \pi \delta^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4} \right) \right\}^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{\left(x - \frac{p_0 t}{\mu} - \frac{Ft^2}{2\mu} \right)^2}{2\delta^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4} \right)} \left(1 - \frac{i\hbar t}{\mu \delta^2} \right) + \right. \\ \left. + \frac{i}{\hbar} (p_0 + Ft) x - \frac{l}{\hbar} \int_0^t \frac{(p_0 + Ft)^2}{2\mu} dt \right\}.$$

В общем случае трехмерного движения в одномерном поле с начальной волновой функцией

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(\pi \delta^2)^{3/4}} e^{-\frac{r^2}{2\delta^2} + \frac{i\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}}{\hbar}}$$

получаем:

$$\psi(r, t) = \frac{1}{\{\pi\delta^2(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4})\}^{3/4}} \exp \left\{ -\frac{\left(r - \frac{p_0 t}{\mu} - \frac{F t^2}{2\mu}\right)^2}{2\delta^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2 \delta^4}\right)} \left(1 - \frac{i\hbar t}{\mu\delta^2}\right) + \right. \\ \left. + \frac{i}{\hbar} (p_0 + Ft) r - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{(p_0 + Ft)^2}{2\mu} dt \right\}.$$

Из этого выражения следует, что распределение плотности вероятности сохраняет гауссовский вид, а центр тяжести пакета движется согласно законам классической механики равномерно-ускоренно. Изменение размера пакета с течением времени происходит так же, как и в отсутствие поля (см. предыдущий пункт).

в) Собственные функции уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \psi_n'' + \frac{\mu\omega^2}{2} x^2 \psi_n = E_n \psi_n$$

имеют следующий вид:

$$\psi_n(x) = c_n e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x),$$

где

$$\alpha = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}, \quad c_n^2 = \frac{1}{2^n n!} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Искомая волновая функция $\psi(x, t)$ согласно (2)

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}, \quad (4)$$

где

$$a_n = c_n c \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\alpha x) \exp \left\{ -\alpha^2 \frac{(x - x_0)^2}{2} + \frac{i p_0 x}{\hbar} - \frac{\alpha^2 x^2}{2} \right\} dx.$$

С целью вычисления a_n воспользуемся выражением для производящей функции полиномов Чебышева — Эрмита

$$e^{-\lambda^2 + 2\lambda\eta} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(\eta). \quad (5)$$

Легко видеть, что $\frac{a_n}{c_n c}$ является коэффициентом при $\frac{\lambda^n}{n!}$ в разложении в ряд по λ выражения

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\lambda^2 + 2\lambda \alpha x - \frac{\alpha^2 (x - x_0)^2}{2} + \frac{i p_0 x}{\hbar} - \frac{\alpha^2 x^2}{2} \right\} dx.$$

В результате вычисления получаем:

$$a_n = c_n c \sqrt{\pi} \left(\alpha x_0 + \frac{i p_0}{\alpha \hbar} \right)^n \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{\alpha^2 x_0^2}{2} + \frac{1}{4} \left(\alpha x_0 + \frac{i p_0}{\alpha \hbar} \right)^2 \right\}.$$

После подстановки этого выражения в (4) оказывается возможным произвести суммирование по n , используя снова соотношение (5). В результате вычисления, вводя обозначение

$$x_0 + \frac{i p_0}{\hbar \alpha^2} = Q e^{-i\delta},$$

получаем:

$$\psi(x, t) = c \exp \left\{ -\frac{\alpha^2}{2} [x - Q \cos(\omega t + \delta)]^2 - i x Q \alpha^2 \sin(\omega t + \delta) - \right. \\ \left. - \frac{i \omega t}{2} + \frac{\alpha^2 Q^2}{4} i [\sin 2(\omega t + \delta) - \sin 2\delta] \right\}.$$

В этом случае при движении не происходит расплывания волнового пакета. Центр тяжести движется по-прежнему по законам классической механики, совершая гармонические колебания с амплитудой Q и частотой ω . Из полученного выражения для ψ следует также, что средний импульс в момент времени t равен величине

$$P(t) = \hbar Q \alpha^2 \sin(\omega t + \delta),$$

т. е. классическому импульсу частицы в осцилляторе.

Выражение

$$\exp \left\{ -\frac{i \omega t}{2} + \frac{\alpha^2 Q^2}{4} i [\sin 2(\omega t + \delta) - \sin 2\delta] \right\}$$

может быть записано как

$$\exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{P^2(t)}{2\mu} dt \right\}.$$

11. Рассмотрим оператор

$$\hat{a}(s) = e^{s\hat{L}}\hat{a}e^{-s\hat{L}},$$

где s — вспомогательный параметр, и найдем дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет $\hat{a}(s)$:

$$\frac{d\hat{a}(s)}{ds} = \hat{L}e^{s\hat{L}}\hat{a}e^{-s\hat{L}} - e^{s\hat{L}}\hat{a}e^{-s\hat{L}}\hat{L} = [\hat{L}\hat{a}(s)].$$

Продифференцируем это уравнение еще раз

$$\frac{d^2\hat{a}(s)}{ds^2} = \left[\hat{L}, \frac{d\hat{a}(s)}{ds} \right] = [\hat{L}[\hat{L}\hat{a}(s)]].$$

Легко видеть, что производная $\frac{d^n\hat{a}(s)}{ds^n}$ равна результату n последовательных перестановок оператора \hat{L} с оператором $\hat{a}(s)$.

Представив теперь оператор

$$e^{\hat{L}}\hat{a}e^{-\hat{L}} = \hat{a}(1)$$

в виде ряда Тейлора

$$\hat{a}(1) = \hat{a}(0) + \frac{d\hat{a}(0)}{ds} + \frac{1}{2!} \frac{d^2\hat{a}(0)}{ds^2} + \dots$$

и выражая производные по s в точке $s=0$ через последовательные перестановки оператора \hat{L} с $\hat{a}(0) = \hat{a}$, получаем доказательство соотношения, приведенного в условии задачи.

12. Оператор Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2\hat{x}^2}{2} - f(t)\hat{x}$$

выразим через операторы \hat{a} и \hat{a}^+ (см. задачу 5 § 1)

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right) - f(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^+)$$

и будем искать решение уравнения Шредингера

$$i\hbar\dot{\psi}(t) = \hat{H}\psi(t)$$

в виде

$$\psi(t) = c(t) e^{\alpha(t)\hat{a}^+} e^{\beta(t)\hat{a}} e^{\gamma(t)\hat{a}^+\hat{a}} \psi(-\infty).$$

При дифференцировании по t оператора, действующего на $\psi(-\infty)$, необходимо иметь в виду, что \hat{a} и \hat{a}^+ некоммутативны:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1.$$

Выражение для производной по времени

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & (\dot{c}e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}} + c\dot{\alpha}\hat{a}^+e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}} + \\ & + c\dot{\beta}e^{\alpha\hat{a}^+}\hat{a}e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}} + c\dot{\gamma}e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}\hat{a}^+\hat{a}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}})\psi(-\infty) \end{aligned}$$

преобразуем так, чтобы оно имело вид

$$\dot{\psi} = \hat{G}e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}}\psi(-\infty),$$

где \hat{G} — некоторый оператор. Рассмотрим сначала третий член в правой части равенства, определяющего $\dot{\psi}$. Замечая, что

$$[(\hat{a}^+)^n a] = -n(\hat{a}^+)^{n-1},$$

находим:

$$\begin{aligned} e^{\alpha\hat{a}^+}\hat{a} &= \left(1 + \alpha\hat{a}^+ + \frac{(\alpha\hat{a}^+)^2}{2} + \dots\right)\hat{a} = \\ &= (\hat{a} - \alpha)\left(1 + \alpha\hat{a}^+ + \frac{(\alpha\hat{a}^+)^2}{2} + \dots\right) = (\hat{a} - \alpha)e^{\alpha\hat{a}^+}. \end{aligned}$$

Поэтому третий член можем записать в виде

$$c\dot{\beta}(\hat{a} - \alpha)e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}}\psi(-\infty).$$

Аналогично преобразуем последний член

$$\begin{aligned} c\dot{\gamma}e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}\hat{a}^+\hat{a}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}} &= c\dot{\gamma}e^{\alpha\hat{a}^+}(\hat{a}^+\hat{a} + \beta\hat{a})e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}} = \\ &= c\dot{\gamma}(\hat{a}^+\hat{a} - \alpha\hat{a}^+ + \beta\hat{a} - \alpha\beta)e^{\alpha\hat{a}^+}e^{\beta\hat{a}}e^{\gamma\hat{a}^+\hat{a}}. \end{aligned}$$

Итак,

$$\hat{G} = c\dot{\gamma}\hat{a}^+\hat{a} + c(\dot{\alpha} - \alpha\dot{\gamma})\hat{a}^+ + c(\dot{\beta} + \beta\dot{\gamma})\hat{a} + \dot{c} - c\dot{\gamma}\alpha\beta$$

и для того, чтобы удовлетворить уравнению Шредингера, мы должны потребовать, чтобы

$$i\hbar\hat{G} = \hat{H}.$$

Сравнивая коэффициенты при операторах $\hat{a}^+ \hat{a}$, \hat{a} , \hat{a}^+ и свободные члены, получаем систему уравнений:

$$\begin{aligned}\dot{\gamma} &= -i\omega, \\ \dot{\alpha} + i\omega\alpha &= \frac{i}{\sqrt{2\hbar\mu\omega}} f(t), \\ \dot{\beta} - i\omega\beta &= \frac{i}{\sqrt{2\hbar\mu\omega}} f(t), \\ \frac{\dot{c}}{c} &= -i\frac{\omega}{2} + \alpha(\dot{\beta} - i\omega\beta).\end{aligned}$$

Решая эти уравнения с начальными условиями $\alpha(-\infty) = 0$, $\beta(-\infty) = 0$, $|c(-\infty)| = 1$, находим:

$$\alpha(t) = \frac{ie^{-i\omega t}}{\sqrt{2\hbar\mu\omega}} \int_{-\infty}^t f(t') e^{i\omega t'} dt',$$

$$\beta(t) = \frac{ie^{i\omega t}}{\sqrt{2\hbar\mu\omega}} \int_{-\infty}^t f(t') e^{-i\omega t'} dt = -\alpha^*(t),$$

$$\gamma(t) = -i\omega t,$$

$$c(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar\mu\omega} \int_{-\infty}^t dt' f(t') e^{-i\omega t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' f(t'') e^{i\omega t''} \right\}.$$

Вероятность перехода из состояния $\psi(-\infty)$ в n -е возбужденное состояние при $t = +\infty$

$$W_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \left| \int \psi_n^* \psi(t) dx \right|^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \left| c \int \psi_n^* e^{\alpha \hat{a}^+} e^{\beta \hat{a}} e^{\gamma \hat{a}^+ \hat{a}} \psi(-\infty) dx \right|^2.$$

Если начальное состояние было основным $\psi(-\infty) = \psi_0$, то поскольку $\hat{a}\psi_0 = 0$, легко находим:

$$e^{\beta \hat{a}} e^{\gamma \hat{a}^+ \hat{a}} \psi_0 = \psi_0.$$

Далее, так как нормированные волновые функции имеют вид

$$\psi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} \psi_0 \quad (\text{см. задачу 5 в } \S 1),$$

то

$$e^{\alpha \hat{a}^+} \psi_0 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} \psi_m.$$

Ввиду соотношений ортогональности $\int \psi_n^* \psi_m dx = \delta_{nm}$ получаем:

$$W_{n0} = \lim_{t \rightarrow \infty} |c(t)|^2 \frac{|\alpha(t)|^{2n}}{n!}.$$

Из формул для $\alpha(t)$ и $c(t)$ находим:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\alpha(t)|^2 = \frac{1}{2\hbar\mu\omega} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \equiv \nu,$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |c(t)|^2 = \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar\mu\omega} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \right|^2 \right\} = e^{-\nu}.$$

Таким образом, окончательно для W_{n0} получаем распределение Пуассона:

$$W_{n0} = e^{-\nu} \frac{\nu^n}{n!},$$

где

$$\nu = \frac{1}{2\hbar\mu\omega} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \right|^2.$$

а) Для $f(t) = f_0 e^{-\frac{t^2}{\tau^2}}$ находим:

$$\nu = \frac{\pi f_0^2 \tau^2}{2\hbar\mu\omega} e^{-\frac{\omega^2 \tau^2}{2}}.$$

б) Для $f(t) = \frac{f_0}{\left(\frac{t}{\tau}\right)^2 + 1}$

$$\nu = \frac{\pi^2 f_0^2 \tau^2}{2\hbar\mu\omega} e^{-2\omega\tau}.$$

13. Уравнение Шредингера для осциллятора с учетом возмущающей силы имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} \psi - f(t) x \psi.$$

Введем новую координату $x_1 = x - \xi(t)$, тогда

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \dot{\xi} \frac{\partial \psi}{\partial x_1} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x_1 + \xi)^2 \psi - f(t) (x_1 + \xi) \psi.$$

Если положить

$$\psi = \exp\left(\frac{i\mu\dot{\xi}x_1}{\hbar}\right)\varphi(x_1, t),$$

то для φ получим уравнение

$$i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2\varphi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x_1^2\varphi + (\mu\ddot{\xi} + \mu\omega^2\xi - f)x_1\varphi - L\varphi,$$

где L — функция Лагранжа $L = \frac{1}{2}\mu\dot{\xi}^2 - \frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2 + f(t)\xi$. В последнем выражении член $(\mu\ddot{\xi} + \mu\omega^2\xi - f)x_1\varphi$ равен нулю, потому что ξ , как функция времени, удовлетворяет классическому уравнению движения осциллятора под действием возмущающей силы

$$\mu\ddot{\xi} + \mu\omega^2\xi = f(t).$$

Если ввести еще новую функцию χ следующим образом

$$\varphi = \chi \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t L dt\right),$$

то для функции χ получим уравнение, совпадающее с уравнением движения свободного осциллятора

$$i\hbar \frac{\partial\chi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2\chi}{\partial x_1^2} + \frac{\mu\omega^2 x_1^2}{2} \chi.$$

Таким образом, волновую функцию осциллятора, подверженного действию возмущающей силы, можно представить в виде

$$\psi(x, t) = \chi[x - \xi(t), t] \exp\left\{\frac{i\mu}{\hbar} \dot{\xi}(x - \xi) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t L dt\right\}.$$

14. Будем искать решение уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\mu\omega^2(t)}{2} x^2\psi. \quad (1)$$

в виде

$$\psi(x, t) = \int G(x, t; x', \tau) \psi(x', \tau) dx'.$$

Легко показать, что функция Грина $G(x, t; x', \tau)$ должна удовлетворять уравнению (1) и начальному условию

$$\lim_{t \rightarrow \tau+0} G(x, t; x', \tau) = \delta(x - x'). \quad (2)$$

Попытаемся удовлетворить этим двум условиям, полагая

$$G(x, t; x', \tau) \sim \exp \left\{ \frac{i}{2\hbar} [a(t)x^2 + 2b(t)x + c(t)] \right\}. \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), получаем уравнения, определяющие a, b, c

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{da}{dt} &= -\frac{a^2}{\mu^2} - \omega^2(t), \\ \frac{db}{dt} &= -\frac{a}{\mu} b, \\ \frac{dc}{dt} &= i\hbar \frac{a}{\mu} - \frac{b^2}{\mu}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Решение системы уравнений (4) имеет вид

$$a = \mu \frac{\dot{Z}}{Z}, \quad b = \frac{\text{const}}{Z}, \quad c = i\hbar \ln Z - \frac{1}{\mu} \int^t b^2 dt, \quad (5)$$

где Z есть решение уравнения

$$\ddot{Z} = -\omega^2(t)Z.$$

Попытаемся подбором постоянных интегрирования удовлетворить начальному условию (2). С этой целью возьмем одно из возможных выражений для δ -функции

$$\delta(x - x') = \lim_{t \rightarrow \tau} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t - \tau)}} \exp \left\{ \frac{i\mu}{2\hbar(t - \tau)} (x - x')^2 \right\} \quad (6)$$

(см. задачу 10 а) § 3).

Для того чтобы выражение (3) переходило при $t \rightarrow \tau$ в (6), необходимо и достаточно, чтобы

$$Z = 0, \quad \dot{Z} = 1 \quad \text{при} \quad t = \tau,$$

$$b = -\frac{\mu x'}{Z},$$

$$c = i\hbar \ln Z + \mu x'^2 \frac{Y}{Z},$$

где Y — решение уравнения $\ddot{Y} = -\omega^2(t)Y$, удовлетворяющее начальным условиям $Y = 1, \dot{Y} = 0$ при $t = \tau$.

Заметим, что так как $\dot{Z}Y - Y\dot{Z} = 1$, то

$$\frac{Y}{Z} = - \int \frac{dt}{Z^2}.$$

Таким образом, для функции Грина поставленной задачи получаем выражение следующего вида:

$$G(x, t; x', \tau) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar Z}} \exp \left\{ \frac{i\mu}{2\hbar Z} (\dot{Z}x^2 - 2xx' + Yx'^2) \right\}.$$

В случае, когда $\omega = \text{const}$, имеем:

$$Z = \frac{1}{\omega} \sin \omega (t - \tau), \quad Y = \cos \omega (t - \tau),$$

и функция Грина в этом случае равна

$$G(x, t; x', \tau) = \sqrt{\frac{\mu\omega}{2\pi\hbar t \sin \omega (t - \tau)}} \exp \left\{ \frac{i\mu\omega}{2\hbar \sin \omega (t - \tau)} (\cos \omega (t - \tau) x^2 - 2xx' + \cos \omega (t - \tau) x'^2) \right\}.$$

15.

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \omega t + \frac{\alpha^4 \hbar^2}{\mu^2 \omega^2} \sin^2 \omega t}} \times \exp \left\{ -\frac{\alpha^2 (x - Q \cos(\omega t + \delta))^2}{\cos^2 \omega t + \frac{\alpha^4 \hbar^2}{\mu^2 \omega^2} \sin^2 \omega t} \right\},$$

где

$$x_0 + \frac{ip_0}{\mu\omega} = Qe^{-i\delta}.$$

В случае, когда $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$, получается результат задачи 10 в) § 3.

16.

$$G(x, t; x', \tau) = \sqrt{\frac{\mu}{2\pi i \hbar Z}} \exp \left\{ \frac{i\mu}{2\hbar Z} [\dot{Z}(x - \xi)^2 - 2(x - \xi)x' + Yx'^2] + \frac{i\mu}{\hbar} \xi(t)(x - \xi) + \frac{i}{\hbar} \int_{\tau}^t L dt \right\}.$$

В этом выражении ξ удовлетворяет уравнению: $\mu \ddot{\xi} = -\mu\omega^2 \xi + f(t)$ и начальным условиям $\xi(\tau) = 0$, $\dot{\xi}(\tau) = 0$, а L — функция Лагранжа, равная $L = \frac{\mu}{2} \dot{\xi}^2 - \frac{\mu\omega^2}{2} \xi^2 + f\xi$.

17. Вероятность перехода из состояния n в состояние m дается соотношением (вычисления будем проводить в системе единиц $\hbar = 1$, $\mu = 1$, $\omega = 1$)

$$P_{mn}(t, 0) = |G_{mn}(t, 0)|^2, \quad (1)$$

где

$$G_{mn}(t, 0) = \int \int \psi_m^*(x) G(x, t; x', 0) \psi_n(x') dx dx'.$$

При помощи производящей функции

$$\exp\left\{-\frac{1}{2}(2z^2 + x^2 - 4zx)\right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\sqrt{\pi} 2^n}{n!}} z^n \psi_n(x)$$

построим функцию $G(u, v)$

$$\begin{aligned} G(u, v) &= \int \int \exp\left\{-\frac{1}{2}(2v^2 + x^2 - 4vx) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}(2u^2 + x'^2 - 4ux')\right\} G(x, t; x', 0) dx dx' = \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\pi 2^{n+m}}{n! m!}} v^m u^n G_{mn}(t, 0). \end{aligned} \quad (2)$$

Из выражения (2) следует, что величины $G_{ij}(t, 0)$, квадраты модулей которых определяют вероятности переходов, являются

с точностью до множителя $\sqrt{\frac{\pi 2^{i+j}}{i! j!}}$ коэффициентами в разложении $G(u, v)$ в ряд по степеням u, v .

Вычислим $G(u, v)$; с этой целью в (2) подставим выражение для функции Грина G (см. задачу 16 § 3).

Подставляя, получим:

$$\begin{aligned} G(u, v) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i Z}} \exp\left\{i \int_0^t L dt - i \xi \dot{\xi} + \frac{i \dot{Z}}{2Z} \xi^2 - u^2 - v^2\right\} \times \\ &\quad \times \int \int \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{i \dot{Z}}{Z}\right)x^2 + \frac{2i}{Z}xx' + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(1 - \frac{i \dot{Y}}{Z}\right)x'^2 - 2\left(2v - \frac{i \dot{Z}}{Z}\xi + i \dot{\xi}\right)x - 2\left(2u + \frac{i \dot{\xi}}{Z}\right)x'\right]\right\} dx dx'. \end{aligned}$$

В случае $\omega = \text{const}$ ξ , Z , Y имеют вид

$$\xi(t) = \int_0^t \sin(t-t') f(t') dt', \quad Z = \sin t, \quad Y = \cos t.$$

При вычислении интеграла воспользуемся формулой

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \exp \left\{ -\frac{1}{2} (ax^2 + 2bxy + cy^2 - 2px - 2qy) \right\} = \\ = \frac{2\pi}{\sqrt{ac - b^2}} \exp \left\{ \frac{aq^2 - 2bpq + cp^2}{2(ac - b^2)} \right\}. \end{aligned}$$

В результате простых вычислений получим следующий вид функции $G(u, v)$:

$$G(u, v) = \sqrt{\pi} e^{iF(t)} e^{-\frac{v}{2}} \exp \left\{ -\frac{AB}{\omega} uv + Au + Bv \right\}.$$

Здесь

$$A = i \int_0^t e^{-it'} f(t') dt', \quad B = e^{-it} A, \quad 2\omega = |A| \cdot |B| = \xi^2 + \xi^2,$$

а $F(t)$ — некоторая действительная функция времени.

Для того чтобы разложить $G(u, v)$ в степенной ряд, воспользуемся соотношением

$$\exp \left\{ \alpha + \beta - \frac{\alpha\beta}{\omega} \right\} = \sum_{m, n=0}^{\infty} c(m, n | \omega) \frac{\alpha^m}{m!} \frac{\beta^n}{n!},$$

где

$$c(m, n | \omega) = \sum_{l=0}^{\min(m, n)} \frac{m! n!}{l! (m-l)! (n-l)!} (-\omega)^{-l}.$$

Производя разложение, получим:

$$G(u, v) = \sqrt{\pi} e^{iF(t)} e^{-\frac{v}{2}} \sum_{m, n=0}^{\infty} c(m, n | \omega) \frac{(Bv)^m}{m!} \frac{(Au)^n}{n!}. \quad (3)$$

Из соотношения (2) и (3) следует, что

$$G_{mn}(t, 0) = \frac{e^{-\frac{w}{2}} \cdot A^n B^m}{\sqrt{2^{n+m} \cdot m! n!}} c(m, n | w) e^{iF(t)},$$

а искомая вероятность перехода равна

$$P_{mn}(t, 0) = \frac{e^{-w \cdot w^{m+n}}}{m! n!} \{c(m, n | w)\}^2.$$

В частном случае $n=0$ вероятность перехода имеет вид

$$P_{m0}(t, 0) = \frac{e^{-w \cdot w^m}}{m!}, \quad \text{так как } c(m, 0 | w) = 1.$$

После того как вероятность перехода вычислена, мы можем определить средние значения энергии и квадрата энергии осциллятора в момент времени t .

Средние значения определяются соотношением

$$\bar{E} = \sum_{m=0}^{\infty} P_{mn}(t, 0) \cdot \left(m + \frac{1}{2}\right),$$

$$\bar{E}^2 = \sum_{m=0}^{\infty} P_{mn}(t, 0) \cdot \left(m + \frac{1}{2}\right)^2.$$

С целью вычисления подобного рода сумм рассмотрим выражение

$$\left(1 - \frac{\alpha}{w}\right)^m e^{\alpha} = \Phi(m, \alpha | w).$$

Легко показать, что

$$\Phi(m, \alpha | w) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} c(m, n | w).$$

Из равенства

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-w \cdot w^m}}{m!} \Phi(m, \alpha | w) \Phi(m, \beta | w) = e^{\alpha\beta/w}$$

вытекает, что

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-w \cdot w^m}}{m!} c(m, n | w) \cdot c(m, n' | w) = \delta_{nn'} n! w^{-n},$$

откуда непосредственно следует физически очевидное соотношение

$$\sum_{m=0}^{\infty} P_{mn} = 1.$$

Рассмотрим равенство

$$\sum_{m=0}^{\infty} m \frac{e^{-w} \cdot w^m}{m!} \Phi(m, \alpha | w) \Phi(m, \beta | w) = \left\{ w - \alpha - \beta + \frac{\alpha\beta}{w} \right\} e^{\alpha\beta/w},$$

дифференцируя его правую и левую части по α n раз, а по β m раз и полагая затем $\alpha = 0$, $\beta = 0$, имеем:

$$\sum_{m=0}^{\infty} m P_{mn} = n + w.$$

Таким образом, среднее значение энергии осциллятора в момент времени t равно $\bar{E} = E_n + w$. Здесь w есть работа силы $f(t)$ за промежуток времени t

$$\begin{aligned} w &= \int_0^t f(t) \dot{\xi} dt = \int_0^t (\ddot{\xi} + \xi) \dot{\xi} dt = \\ &= \frac{1}{2} (\dot{\xi}^2 + \xi^2)_{t=t} - \frac{1}{2} (\dot{\xi}^2 + \xi^2)_{t=0}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом находим:

$$\bar{E}^2 = 2wE_n.$$

$$20. \text{ а) } \hat{x}(t) = x - \frac{i\hbar}{\mu} t \frac{\partial}{\partial x},$$

$$\text{ б) } \hat{x}(t) = x \cos \omega t - \frac{i\hbar}{\mu\omega} \sin \omega t \frac{\partial}{\partial x}.$$

$$21. \overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_0^2} + \frac{t}{\mu} \overline{[(\Delta p)(\Delta x) + (\Delta x)(\Delta p)]_0} + \frac{t^2}{\mu^2} \overline{(\Delta p)_0^2}.$$

Замечание. Из приведенного соотношения легко определить момент времени τ , в который величина $\overline{(\Delta x)^2}$ имеет минимальное значение. Функция $\overline{(\Delta x)_t^2}$ является симметричной функцией относительно точки τ . В том случае, когда волновая функция в момент времени $t=0$ имеет вид

$\psi(x) = \varphi(x) e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}$ ($\varphi(x)$ — действительная функция) $\tau = 0$ (см. задачу 10 а) § 3).

$$22. \text{ а) } \overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{\mu^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 dx,$$

$$\text{ б) } \overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2} \cdot \cos^2 \omega t + \frac{\hbar^2}{\mu^2 \omega^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 \sin^2 \omega t dx.$$

§ 4. МОМЕНТ КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ. СПИН.

1. Как известно, при бесконечно малом повороте системы координат волновая функция преобразуется следующим образом:

$$\psi'(r) = \{1 + i d\alpha \hat{l}\} \psi(r). \quad (1)$$

Здесь $d\alpha$ — вектор, направленный вдоль оси вращения и по величине равный углу поворота, а \hat{l} — оператор орбитального момента количества движения.

Рассмотрим сперва поворот относительно оси z на угол $d\alpha$. При таком вращении имеем:

$$\psi'(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi + d\alpha) = \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} d\alpha. \quad (2)$$

Сравнивая (2) с (1), получаем:

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Для того чтобы получить вид оператора \hat{l}_x в сферических координатах, совершим поворот относительно оси x .

Тогда

$$\begin{aligned} \psi'(r, \theta, \varphi) &= \psi(r, \theta + d\theta, \varphi + d\varphi) = \\ &= \left\{ 1 + \left(\frac{d\theta}{d\alpha} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{d\varphi}{d\alpha} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) d\alpha \right\} \psi(r, \theta, \varphi), \end{aligned}$$

откуда следует, что

$$\hat{l}_x = -i \left(\frac{d\theta}{d\alpha} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{d\varphi}{d\alpha} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Вычислим $\frac{d\theta}{d\alpha}$ и $\frac{d\varphi}{d\alpha}$.

Легко видеть, что

$$z' - z = -y d\alpha,$$

$$y' - y = z d\alpha,$$

и так как $z' = r \cos \theta$, $y' = r \sin \theta \sin \varphi$, то имеем:

$$\frac{d\theta}{d\alpha} = -\sin \varphi, \quad \frac{d\varphi}{d\alpha} = -\operatorname{ctg} \theta \cdot \cos \varphi,$$

следовательно,

$$\hat{l}_x = i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cdot \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Поступая аналогично, получим:

$$\hat{l}_y = -i \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \operatorname{ctg} \theta \cdot \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

5.

$$\hat{l}_z' = \hat{l}_x \cos(xz') + \hat{l}_y \cos(yz') + \hat{l}_z \cos(zz').$$

7. Преобразование можно записать в матричной форме

$$\begin{pmatrix} e^{i(\psi+\varphi)} \cos^2 \frac{\theta}{2}, & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \sin \theta, & -e^{-i(\psi-\varphi)} \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\psi} \sin \theta, & \cos \theta, & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\psi} \sin \theta, \\ -e^{i(\psi-\varphi)} \sin^2 \frac{\theta}{2}, & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \sin \theta, & e^{-i(\psi+\varphi)} \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{10} \\ Y_{1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y'_{11} \\ Y'_{10} \\ Y'_{1,-1} \end{pmatrix}.$$

8. Пользуясь результатом предыдущей задачи, получаем в случае $M=1$:

$$\omega(+1) = \cos^4 \frac{\theta}{2}, \quad \omega(0) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta, \quad \omega(-1) = \sin^4 \frac{\theta}{2},$$

для $M=0$:

$$\omega(+1) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta, \quad \omega(0) = \cos^2 \theta, \quad \omega(-1) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta$$

и, наконец, в случае $M=-1$:

$$\omega(+1) = \sin^4 \frac{\theta}{2}, \quad \omega(0) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta, \quad \omega(-1) = \cos^4 \frac{\theta}{2}.$$

9.

$$\omega\left(+\frac{1}{2}\right) = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad \omega\left(-\frac{1}{2}\right) = \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

Среднее значение проекции спина равно $\frac{1}{2} \cos \theta$.

10. Воспользуемся матрицей преобразования компонент спиновой функции при повороте координатных осей. Эта матрица имеет вид

$$\begin{pmatrix} e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \cos \frac{\theta}{2} & ie^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \sin \frac{\theta}{2} \\ ie^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)} \sin \frac{\theta}{2} & e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

С помощью этой матрицы находим спиновую функцию в новой системе координат

$$\begin{aligned} \psi'_1 &= e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)+i\alpha} \cos \frac{\theta}{2} \cdot \cos \delta + ie^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)+i\beta} \sin \frac{\theta}{2} \cdot \sin \delta, \\ \psi'_2 &= ie^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)+i\alpha} \sin \frac{\theta}{2} \cdot \cos \delta + e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)+i\beta} \cos \frac{\theta}{2} \cdot \sin \delta. \end{aligned}$$

Найдем вероятность того, что спин направлен вдоль оси z' :

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \psi'^*_1 \psi'_1 = \cos^2 \frac{\theta}{2} \cdot \cos^2 \delta + \sin^2 \frac{\theta}{2} \cdot \sin^2 \delta + \\ &+ \frac{1}{2} \sin \theta \cdot \sin 2\delta \cdot \sin(\psi + \alpha - \beta). \end{aligned}$$

Из этой формулы следует, что вероятность значения проекции спина вдоль произвольного направления зависит только от разности $\alpha - \beta$ и не зависит от α и β в отдельности.

11. Направление спина определяется углами

$$\theta = 2\delta, \quad \Phi = \frac{\pi}{2} + \beta - \alpha.$$

12. Да, можно. В случае смешанного ансамбля, как бы ни было направлено неоднородное магнитное поле, всегда будет иметь место расщепление на два пучка. В случае чистого ансамбля соответствующим расположением прибора можно добиться исчезновения одного пучка.

16. При бесконечно малом повороте относительно оси x на угол $d\alpha$ компоненты спиновой функции изменяются согласно выражению

$$(1 + id\alpha \hat{s}_x) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \\ \psi_{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_0 \\ \psi'_{-1} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где

$$\hat{s}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Выражение (1) эквивалентно трем дифференциальным уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_1}{d\alpha} &= \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_0, \\ \frac{d\psi_0}{d\alpha} &= \frac{i}{2} (\psi_1 + \psi_{-1}), \\ \frac{d\psi_{-1}}{d\alpha} &= \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_0, \end{aligned}$$

из решения которых легко получить матрицу преобразования, имеющую вид

$$\begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\alpha}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \alpha & -\sin^2 \frac{\alpha}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \alpha & \cos \alpha & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \alpha \\ -\sin^2 \frac{\alpha}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \alpha & \cos^2 \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}.$$

Аналогично получается матрица преобразования при повороте относительно оси z на угол α

$$\begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix}.$$

В качестве углов, характеризующих поворот, возьмем углы Эйлера ψ , θ , φ . Тогда для того, чтобы найти матрицу искомого преобразования, надо перемножить три матрицы.

Вычисляя, получаем:

$$\begin{pmatrix} e^{i(\psi+\varphi)} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\varphi} \sin \theta & -e^{-i(\psi-\varphi)} \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} e^{i\psi} \sin \theta & \cos \theta & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\psi} \sin \theta \\ -e^{i(\psi-\varphi)} \sin^2 \frac{\theta}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} e^{-i\varphi} \sin \theta & e^{-i(\psi+\varphi)} \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Заметим, что тот же самый результат можно получить, рассматривая преобразование симметрического спинора второго ранга. Между компонентами спиновой функции и компонентами симметрического спинора существует связь

$$\psi^{11} = \psi_1, \quad \psi^{12} = \psi^{21} = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_0, \quad \psi^{22} = \psi_{-1}. \quad (3)$$

Спинор 2-го ранга преобразуется как произведение двух спиноров первого ранга, т. е.

$$\begin{aligned} \psi'^{11} &= \alpha^2 \psi^{11} + 2\alpha\beta \psi^{12} + \beta^2 \psi^{22}, \\ \psi'^{12} &= \alpha\gamma \psi^{11} + (\alpha\delta + \beta\gamma) \psi^{12} + \beta\delta \psi^{22}, \\ \psi'^{22} &= \gamma^2 \psi^{11} + 2\gamma\delta \psi^{12} + \delta^2 \psi^{22}. \end{aligned}$$

Или, заменяя компоненты спинора через компоненты спиновой функции согласно (3), получаем:

$$\begin{aligned} \psi'_1 &= \alpha^2 \psi_1 + \sqrt{2}\alpha\beta \psi_0 + \beta^2 \psi_{-1}, \\ \psi'_0 &= \sqrt{2}\alpha\gamma \psi_1 + (\alpha\delta + \beta\gamma) \psi_0 + \sqrt{2}\beta\delta \psi_{-1}, \\ \psi'_{-1} &= \gamma^2 \psi_1 + \sqrt{2}\gamma\delta \psi_0 + \delta^2 \psi_{-1}. \end{aligned}$$

Подставляя в написанные соотношения значения коэффициентов

$$\begin{aligned} \alpha &= e^{\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \cos \frac{\theta}{2}, & \beta &= i \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}, \\ \gamma &= i \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{-\frac{i}{2}(\varphi-\psi)}, & \delta &= e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\psi)} \cos \frac{\theta}{2}, \end{aligned}$$

получим выражение (2).

17. Чтобы найти искомую вероятность, воспользуемся формальным приемом, который заключается в том, что вместо частицы с моментом j можно рассматривать систему, состоящую из $2j$ частиц со спином $1/2$. Поскольку по условиям задачи проекция момента частицы равна j , то в эквивалентной системе из $2j$ частиц все частицы имеют проекцию спина на ось z , равную $+1/2$. Вероятность проекции спина $+1/2$ (или $-1/2$) на ось z' каждой такой частицы равна $\cos^2 \frac{\theta}{2}$ (или $\sin^2 \frac{\theta}{2}$) (см. задачу 9 § 4). Для того чтобы значение проекции полного момента этих частиц на ось z'

было равно m , необходимо, чтобы $j + m$ частиц имели проекции на ось $z + 1/2$, а остальные $j - m$ частиц $-1/2$.

Искомую вероятность $\omega(m)$ получим, умножая $\left(\cos^2 \frac{\theta}{2}\right)^{j+m} \times \left(\sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^{j-m}$ на число всех способов разбиения $2j$ частиц на две такие группы, т. е. на $\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}$. Итак,

$$\omega(m) = \frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2}\right)^{j+m} \left(\sin^2 \frac{\theta}{2}\right)^{j-m}.$$

Легко убедиться, что $\sum_{-j}^{+j} \omega(m) = 1$.

18. Состояние системы с моментом J будем описывать симметрическим спинором ранга $2J$. Для решения поставлен-

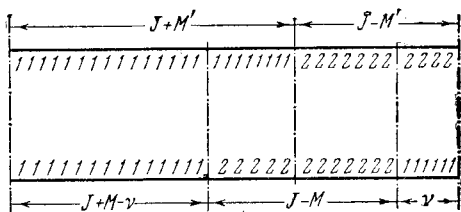


Рис. 23.

ной задачи нам нужно установить связь между компонентами

$$\psi_{\overbrace{11 \dots 1}^{J+M} \overbrace{22 \dots 2}^{J-M}}, \quad \psi'_{\overbrace{11 \dots 1}^{J+M'} \overbrace{22 \dots 2}^{J-M'}}.$$

Из рассмотрения рис. 23 легко установить, что

$$\psi_{\overbrace{11 \dots 1}^{J+M} \overbrace{22 \dots 2}^{J-M}} = \frac{(J+M)!(J-M)!}{(2J)!} \times$$

$$\times \sum_{\nu=0} (2J)! \frac{(\gamma)^\nu (\beta)^{M'-M+\nu} (\alpha)^{J+M-\nu} (\delta)^{J-M'-\nu}}{\nu! (M'-M+\nu)! (J+M-\nu)! (J-M'-\nu)!} \psi'_{\overbrace{11 \dots 1}^{J+M} \overbrace{22 \dots 2}^{J-M}},$$

где $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ — параметры Кейли — Клейна.

Так как

$$\psi_{\overbrace{11 \dots 1}^{J+M} \overbrace{22 \dots 2}^{J-M}} = \sqrt{\frac{(J+M)!(J-M)!}{(2J)!}} \psi(M),$$

$$\psi'_{\overbrace{11 \dots 1}^{J+M'} \overbrace{22 \dots 2}^{J-M'}} = \sqrt{\frac{(J+M')!(J-M')!}{(2J)!}} \psi'(M')$$

и $\psi(M) = 1$ по условию, то

$$\psi'(M') = \sqrt{(J+M')!(J-M')!(J+M)!(J-M)!} \times$$

$$\times \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\gamma)^\nu (\beta)^{M'-M+\nu} (\alpha)^{J+M-\nu} (\delta)^{J-M'-\nu}}{\nu! (M'-M+\nu)! (J+M-\nu)! (J-M'-\nu)!}.$$

Откуда следует, что

$$P(M, M') = (J+M')!(J-M')!(J+M)!(J-M)! \left(\cos \frac{\vartheta}{2}\right)^{4J} \times$$

$$\times \left\{ \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^\nu \left(\operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}\right)^{2\nu-M+M'}}{\nu! (M'-M+\nu)! (J+M-\nu)! (J-M'-\nu)!} \right\}^2.$$

Под знаком суммы единицу, деленную на факториал от отрицательного числа, следует везде полагать равной нулю, т. е., иными словами, суммирование по ν следует производить по тем значениям, которые удовлетворяют неравенствам

$$\begin{aligned} \nu &\geq M - M', \\ \nu &\leq J + M, \\ \nu &\leq J - M'. \end{aligned}$$

20. Найдем сперва собственные функции оператора \hat{j}_z . С этой целью запишем оператор \hat{j}_z в матричной форме

$$\hat{j}_z = \begin{pmatrix} \hat{l}_z + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \hat{l}_z - \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Так как $\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$, то, уравнение, определяющее собствен-

ные функции и собственные значения \hat{j}_z , имеет вид

$$\begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial \psi_1}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} \psi_1 &= m \psi_1, \\ -i \frac{\partial \psi_2}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \psi_2 &= m \psi_2. \end{aligned}$$

Откуда вытекает, что

$$\psi_1 = f_1(r, \vartheta) e^{i(m - \frac{1}{2})\varphi}, \quad \psi_2 = f_2(r, \vartheta) e^{i(m + \frac{1}{2})\varphi},$$

где f_1 и f_2 — произвольные функции r, ϑ , m — полуцелое число.

Из всех возможных функций вида

$$\begin{pmatrix} f_1(r, \vartheta) e^{i(m - \frac{1}{2})\varphi} \\ f_2(r, \vartheta) e^{i(m + \frac{1}{2})\varphi} \end{pmatrix}$$

мы должны отобрать те, которые являются одновременно собственными функциями оператора \hat{l}^2 . Такими собственными функциями будут функции

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m - 1/2}(\vartheta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m + 1/2}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

Последний этап конструирования будет заключаться в том, чтобы путем выбора R_1 и R_2 сделать написанную функцию собственной функцией оператора квадрата полного момента. С этой целью уравнение $\hat{j}^2 \psi = j(j+1)\psi$ запишем в матричной форме

$$\begin{pmatrix} \hat{l}^2 + \frac{3}{4} + \hat{l}_z & \hat{l}_x - i\hat{l}_y \\ \hat{l}_x + i\hat{l}_y & \hat{l}^2 + \frac{3}{4} - \hat{l}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m - 1/2}(\vartheta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m + 1/2}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix} = \\ = j(j+1) \begin{pmatrix} R_1(r) Y_{l, m - 1/2}(\vartheta, \varphi) \\ R_2(r) Y_{l, m + 1/2}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix}.$$

Примем во внимание свойства шаровых функций

$$(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) Y_{lm} = \sqrt{(l+m+1)(l-m)} Y_{l, m+1},$$

$$(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) Y_{lm} = \sqrt{(l-m+1)(l+m)} Y_{l, m-1}.$$

Тогда из написанного матричного соотношения следует, что R_1 и R_2 должны удовлетворять двум однородным уравнениям

$$\left[l(l+1) - j(j+1) + m + \frac{1}{4} \right] R_1 + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m^2} R_2 = 0,$$

$$\sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m^2} R_1 + \left[l(l+1) - j(j+1) - m + \frac{1}{4} \right] R_2 = 0.$$

Из условия совместности этих уравнений следует, что j может быть равно либо $l + 1/2$, либо $l - 1/2$. Полагая, что $j = l + 1/2$, получаем:

$$R_1 = \sqrt{l + \frac{1}{2} + m} R(r), \quad R_2 = \sqrt{l - m + \frac{1}{2}} R(r).$$

Таким образом,

$$\psi\left(l, j = l + \frac{1}{2}, m\right) = R(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m-1/2} \\ \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m+1/2} \end{pmatrix}$$

$$(l = 0, 1, 2, \dots),$$

аналогично при $j = l - 1/2$ имеем:

$$\psi\left(l, j = l - \frac{1}{2}, m\right) = R(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m-1/2} \\ -\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, m+1/2} \end{pmatrix}$$

$$(l = 1, 2, 3, \dots).$$

Множитель $\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$ добавлен из соображения нормировки.

21.

| | Вероятность | |
|---|--------------------------------------|--------------------------------------|
| | $j = l + 1/2$ | $j = l - 1/2$ |
| Проекция орб. м. $m - 1/2$ Проекция спина $1/2$ | $\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}$ | $\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}$ |
| Проекция орб. м. $m + 1/2$ Проекция спина $-1/2$ | $\frac{l - m + \frac{1}{2}}{2l + 1}$ | $\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}$ |

$$\bar{l}_z(j = l + 1/2) = \frac{2ml}{2l + 1}, \quad \bar{s}_z(j = l + 1/2) = \frac{m}{2l + 1},$$

$$\bar{l}_z(j = l - 1/2) = \frac{2m(l + 1)}{2l + 1}, \quad \bar{s}_z(j = l - 1/2) = -\frac{m}{2l + 1}.$$

22. Собственные функции оператора проекции спина на направление Θ , Φ находим из соотношения

$$(\sigma_x \sin \Theta \cos \Phi + \sigma_y \sin \Theta \sin \Phi + \sigma_z \cos \Theta) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix},$$

откуда следует, что

$$\alpha \sin \Theta e^{i\Phi} - \beta \cos \Theta = \beta. \quad (1)$$

Из (1) находим отношение $\frac{\alpha}{\beta}$:

$$\frac{\alpha}{\beta} = \operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} e^{-i\Phi}. \quad (2)$$

С другой стороны, из явного вида функций $\psi(l, j = l + \frac{1}{2}, m)$ и $\psi(l, j = l - \frac{1}{2}, m)$ находим:

$$\frac{\alpha}{\beta} = c_j \frac{Y_{l, m-1/2}(\vartheta, \varphi)}{Y_{l, m+1/2}(\vartheta, \varphi)} = c_j \frac{P_l^{m-1/2}(\cos \vartheta)}{P_l^{m+1/2}(\cos \vartheta)} e^{-i\varphi}, \quad (3)$$

где

$$c_j = \sqrt{\frac{l+m+1/2}{l-m+1/2}} \quad \text{при } j = l + 1/2,$$

$$c_j = -\sqrt{\frac{l-m+1/2}{l+m+1/2}} \quad \text{при } j = l - 1/2.$$

Приравнивая (2) и (3), находим, что $\Phi = \varphi$, т. е. направление спина в данной точке пространства лежит в плоскости, проходящей через ось z и данную точку. Угол Θ определяется из условия

$$\operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} = c_j \frac{P_l^{m-1/2}(\cos \vartheta)}{P_l^{m+1/2}(\cos \vartheta)}.$$

23. Оператор квадрата полного спина равен

$$\hat{S}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_2 + \\ + \frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_2 \right\},$$

индексы 1, 2 указывают номер частицы.

Определим собственные функции этого оператора сначала для случая, когда проекция полного спина равна нулю

$$\hat{S}^2 \left\{ a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} = \lambda \left\{ a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\}.$$

Отсюда находим:

$$(\lambda - 1)a - b = 0, \quad -a + (\lambda - 1)b = 0.$$

Для λ имеем два значения $\lambda = 2$ и $\lambda = 0$.

При $\lambda = 2$ $a = b$, а при $\lambda = 0$ $a = -b$. Учитывая условия нормировки $a^2 + b^2 = 1$, получаем собственные функции в виде

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \quad \lambda = 2 \quad (S = 1), \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right\} \quad \lambda = 0 \quad (S = 0).$$

Легко убедиться, что функции $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2$ тоже будут являться собственными функциями оператора \hat{S}^2 , при-

чем в первом случае проекция спина на ось z равна 1, а во втором — 1. Найденные функции будут также собственными функциями оператора $\hat{s}_1 \hat{s}_2$.

24. Волновая функция системы $\Psi(J, M)$ имеет вид суммы произведений функций отдельных частиц

$$\Psi(J, M) = c_1 \psi_1^{(1)} \psi_{M-1}^{(2)} + c_0 \psi_0^{(1)} \psi_M^{(2)} + c_{-1} \psi_{-1}^{(1)} \psi_{M+1}^{(2)},$$

здесь нижний значок у волновых функций указывает значение проекции момента.

Коэффициенты c_i должны быть определены из условия

$$\hat{J}^2 \Psi(J, M) = J(J+1) \Psi(J, M). \quad (1)$$

Волновые функции первой частицы удобно записать в виде

$$\psi_1^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_0^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{-1}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

При такой записи волновых функций оператор \hat{l}_1 будет иметь вид трехрядных матриц

$$\hat{l}_{1x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_{1y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{l}_{1z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

а для оператора \hat{J}^2 получим:

$$\hat{J}^2 = \hat{l}_1^2 + \hat{l}_2^2 + 2\hat{l}_1 \hat{l}_2 =$$

$$= \begin{pmatrix} l(l+1) + 2 + 2\hat{l}_{2z} & \sqrt{2} \hat{l}_{2-} & 0 \\ \sqrt{2} \hat{l}_{2+} & l(l+1) + 2 & \sqrt{2} \hat{l}_{2-} \\ 0 & \sqrt{2} \hat{l}_{2+} & l(l+1) + 2 - 2\hat{l}_{2z} \end{pmatrix},$$

где

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y.$$

Воспользовавшись свойствами операторов \hat{l}_+ и \hat{l}_-

$$\begin{aligned}\hat{l}_+\psi_m &= \sqrt{(l+m+1)(l-m)}\psi_{m+1}, \\ \hat{l}_-\psi_m &= \sqrt{(l+m)(l-m-1)}\psi_{m-1},\end{aligned}$$

находим, что из условия (1) следуют два уравнения:

$$\begin{aligned}[J(J+1) - l(l+1) - 2M]c_1 &= \sqrt{2}\sqrt{(l+M)(l-M+1)}c_0, \\ [J(J+1) - l(l+1) + 2M]c_{-1} &= \sqrt{2}\sqrt{(l+M+1)(l-m)}c_0\end{aligned}$$

(третье уравнение удовлетворяется тождественно).

Решая эти уравнения, получаем для $c(J, M)$:

$$\begin{pmatrix} c_1(l+1, M) & c_0(l+1, M) & c_{-1}(l+1, M) \\ c_1(l, M) & c_0(l, M) & c_{-1}(l, M) \\ c_1(l-1, M) & c_0(l-1, M) & c_{-1}(l-1, M) \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{(l+M)(l+M+1)}{2(2l+1)(l+1)}} & \sqrt{\frac{(l+M+1)(l-M+1)}{(2l+1)(l+1)}} & \sqrt{\frac{(l-M)(l-M+1)}{2(2l+1)(l+1)}} \\ -\sqrt{\frac{(l+M)(l-M+1)}{2l(l+1)}} & \frac{M}{\sqrt{l(l+1)}} & \sqrt{\frac{(l+M+1)(l-M)}{2l(l+1)}} \\ \sqrt{\frac{(l-M)(l-M+1)}{2l(2l+1)}} & -\sqrt{\frac{(l+M)(l-M)}{l(2l+1)}} & \sqrt{\frac{(l+M)(l+M+1)}{2l(2l+1)}} \end{pmatrix}.$$

В силу ортогональности этой матрицы обратная к ней совпадает с транспонированной, и поэтому каждая из функций $\psi_1^{(1)}\psi_{M-1}^{(2)}$, $\psi_0^{(1)}\psi_M^{(2)}$, $\psi_{-1}^{(1)}\psi_{M+1}^{(2)}$ выражается в виде линейной комбинации $\Psi(l+1, M)$, $\Psi(l, M)$, $\Psi(l-1, M)$ с коэффициентами, стоящими в столбцах этой матрицы.

$$29. \quad \bar{\mu}_x = \bar{\mu}_y = 0,$$

$$\bar{\mu}_z = M_J \left\{ \frac{1}{2} (g_1 + g_2) + \frac{1}{2} (g_1 - g_2) \frac{J_1(J_1+1) - J_2(J_2+1)}{J(J+1)} \right\}.$$

$$30. \quad -0,24.$$

$$31. \quad -1,91.$$

$$32. \quad \text{а) } 0,879, \text{ б) } 0,5, \text{ в) } 0,689, \text{ г) } 0,310.$$

$$33. \quad \text{Вес } D \text{ волны равен } 0,04.$$

$$34. \quad \text{а) } -\frac{1}{10} r^2; \quad \text{б) } \frac{1}{20} r^2. \text{ Обратить внимание на различие}$$

в знаке квадрупольного момента в состояниях 1P_1 и 3P_1 .

39. Состояние с определенным значением J (J^2 есть интеграл движения) может быть сконструировано из состояний

с $L = J - 1/2$, $L = J + 1/2$. Преобразование инверсии ($x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$, $z \rightarrow -z$) оставляет неизменным оператор Гамильтона замкнутой системы (четность является интегралом движения). Четность состояний с $L = J - 1/2$ и $L = J + 1/2$ различна. Из этого вытекает, что в состоянии с заданным значением J орбитальный момент L , соответствующий относительному движению частиц, имеет вполне определенное значение.

40. Спин α -частицы и спин ядра B равен нулю, поэтому L -орбитальный момент относительного движения системы α -частицы плюс ядро-продукт равен единице. Следовательно, эта система будет находиться в нечетном состоянии (α -частица четна), тогда как исходное ядро было четным.

42. Не может.

§ 5. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ

1. Заменой $R_{nl} = \frac{\chi_{nl}}{r}$ уравнение для R_{nl} приводится к виду

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \chi_{nl}'' - \left[E_{nl} - U(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] \chi_{nl} = 0.$$

Это уравнение совпадает формально с уравнением Шредингера для одномерного движения в области $0 \leq r < \infty$ с эффективным потенциалом

$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

Поскольку $\chi_{nl} = rR_{nl}$ обращается при $r=0$ в нуль, то можно принять, что $U = +\infty$ при $r < 0$ для этой одномерной задачи.

2. В уравнение для $\chi = Rr$

$$\chi'' + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \chi = 0$$

делаем подстановку

$$\chi = Ae^{i\frac{S}{\hbar}},$$

где A и S — действительные функции.

Приравнивая нулю отдельно действительную и мнимую части уравнения, получаем:

$$2A'S' + S''A = 0, \quad (1)$$

$$S'^2 - \frac{\hbar^2 A''}{A} = 2\mu [E - U(r)] - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}. \quad (2)$$

Из первого уравнения находим:

$$A = \frac{\text{const}}{\sqrt{S'}}.$$

Второе уравнение решаем приближенно, считая \hbar^2 малой величиной. При этом надо, однако, иметь в виду, что при переходе к классической механике ($\hbar \rightarrow 0$) следует считать, что $\hbar l$ конечно, так как $\hbar l$ представляет собою момент в классической механике. Таким образом, в уравнении (2) малым можно считать лишь член $\frac{\hbar^2 A''}{A}$. При малых r (когда доминирующим в правой стороне (2) становится $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}$)

имеем $S' \approx \frac{i\hbar \sqrt{l(l+1)}}{r}$, $A \sim \sqrt{r}$, откуда находим приближенное выражение $\frac{\hbar^2 A''}{A} \approx -\frac{\hbar^2}{4r^2}$, поэтому лучшее приближение для S получится, если учесть этот член, подставив в (2) это приближенное равенство (при больших r такая поправка несущественна). Таким образом, находим:

$$S = \int \sqrt{2\mu [E - U(r)] - \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{r^2}} dr,$$

$$A = \frac{\text{const}}{\sqrt[4]{2\mu [E - U(r)] - \frac{\hbar^2 (l + 1/2)^2}{r^2}}}.$$

3. Представим оператор Гамильтона в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}, \quad \text{где} \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + U(r).$$

Тогда минимальные значения энергии и соответствующие им собственные волновые функции связаны соотношениями

$$E_l^{\min} = \int \psi_l^* \left\{ \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right\} \psi_l d\tau,$$

$$E_{l+1}^{\min} = \int \psi_{l+1}^* \left\{ \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 (l+1)(l+2)}{2\mu r^2} \right\} \psi_{l+1} d\tau.$$

Последнее выражение представим в виде

$$E_{l+1}^{\min} = \int \psi_{l+1}^* \left\{ \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right\} \psi_{l+1} d\tau + \\ + \int \frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu r^2} \psi_{l+1}^* \psi_{l+1} d\tau.$$

Сравним первый член в этом выражении с E_l^{\min} . Поскольку ψ_l соответствует минимальному собственному значению оператора $\hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$, то

$$\int \psi_{l+1}^* \left\{ \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right\} \psi_{l+1} d\tau > \\ > \int \psi_l^* \left\{ \hat{H}_0 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right\} \psi_l d\tau.$$

Что касается интеграла $\int \frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu r^2} \psi_{l+1}^* \psi_{l+1} d\tau$, то он всегда больше нуля. Следовательно, $E_l^{\min} < E_{l+1}^{\min}$, т. е. вышеприведенное утверждение доказано.

4. $\hat{p}_1 + \hat{p}_2 \equiv \hat{P} = -i\hbar \nabla_R$; $\hat{l}_1 + \hat{l}_2 \equiv \hat{L} = [R\hat{P}] + [r\hat{p}]$, причем $\hat{p} = -i\hbar \nabla_r$.

5. Потенциальная энергия $U(r) = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}$.

Радиальная часть R волновой функции удовлетворяет уравнению

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left\{ \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{\mu^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0.$$

Подставляя сюда $\chi = Rr$ и вводя обозначения

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad \frac{\mu\omega}{\hbar} = \lambda,$$

имеем:

$$\chi'' + \left\{ k^2 - \lambda^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} \chi = 0. \quad (1)$$

Учитывая асимптотическое поведение χ при $r \rightarrow 0$ и при $r \rightarrow \infty$, решение для χ ищем в виде

$$\chi = r^{l+1} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} u(r). \quad (2)$$

Подставляя (2) в (1), получаем уравнение, определяющее функцию $u(r)$:

$$u'' + 2 \left\{ \frac{l+1}{r} - \lambda r \right\} u' - \{2\lambda(l + 3/2) - k^2\} u = 0. \quad (3)$$

Посредством введения новой независимой переменной $\xi = \lambda r^2$ уравнение (3) сводится к дифференциальному уравнению следующего типа:

$$\xi \frac{d^2 u}{d\xi^2} + \{(l + 3/2) - \xi\} \frac{du}{d\xi} + \left\{ \frac{1}{2}(l + 3/2) - \frac{1}{2}s \right\} u = 0,$$

где

$$s = \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{E}{\hbar\omega}.$$

Решение этого уравнения есть вырожденная гипергеометрическая функция

$$u = F \left\{ \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - s \right), l + 3/2; \xi \right\}.$$

Требование убывания R при $r \rightarrow \infty$ дает:

$$\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - s \right) = -n_r \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots)$$

и, следовательно, уровни энергии равны $E_{n_r, l} = \hbar\omega(l + 2n_r + 3/2)$, а волновые функции

$$\psi_{n_r, l, m} = r^l e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} F \left\{ -n_r, l + 3/2, \lambda r^2 \right\} Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

6. Волновые функции

$$\Phi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z),$$

где

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \lambda^{n+1} n!}} \frac{1}{\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}} \left(\lambda x - \frac{\partial}{\partial x} \right)^n e^{-\frac{\lambda x^2}{2}}.$$

Соответствующие им уровни энергии

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \quad (\text{см. задачу 5 § 1}).$$

Связь между $\psi_{n_r, l m}$ и Φ_{n_1, n_2, n_3} для $n_r = 0$, $l = 1$ имеет вид

$$\psi_{011} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{100} + i\Phi_{010}),$$

$$\psi_{010} = \Phi_{001},$$

$$\psi_{01, -1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{100} - i\Phi_{010}).$$

7.

$$Z_n = (n+1)(n+2),$$

где

$$n = 2n_r + l.$$

8. Для He_2^4

$$\rho(r) = \frac{4}{(r_0 \sqrt{2\pi})^3} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_0}\right)^2},$$

где

$$r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}; \quad R = r_0.$$

Для O_8^{16}

$$\rho(r) = \frac{4}{(r_0 \sqrt{2\pi})^3} \left(1 + \frac{r^2}{r_0^2}\right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r}{r_0}\right)^2},$$

$$R = 3,73r_0.$$

9. Уравнение для радиальной функции имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} R + \{U(r) - E\} R = 0,$$

где μ — приведенная масса, $\mu = \frac{M_p M_n}{M_p + M_n} \approx \frac{M}{2}$, поскольку $M_p \approx M_n = M$.

Полагая $l = 0$ и $R = \frac{\chi(r)}{r}$, находим

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + A e^{-\frac{r}{a}} \right) \chi = 0.$$

Произведя замену переменных

$$\xi = e^{-\frac{r}{2a}},$$

получим:

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{d\chi}{d\xi} + \left(c^2 - \frac{k^2}{\xi^2}\right)\chi = 0,$$

где

$$c^2 = \frac{8\mu}{k^2} Aa^2;$$

$$k^2 = -\frac{8\mu}{\hbar^2} Ea^2 > 0.$$

Общее решение этого уравнения

$$\chi = B_1 J_k(c\xi) + B_2 J_{-k}(c\xi).$$

При $r \rightarrow \infty$ ($\xi = 0$) волновая функция стационарного состояния должна обращаться в нуль, так что $B_2 = 0$, и, следовательно,

$$R = \frac{B_1}{r} J_k\left(ce^{-\frac{r}{2a}}\right).$$

Чтобы R было конечным при $r = 0$, должно быть

$$J_k(c) = 0.$$

Это уравнение дает связь между a и A . При этом для получения величин a и A , относящихся к основному состоянию, надо, чтобы c было первым корнем бесселевой функции (радиальная волновая функция не должна иметь узлов).

| $a \cdot 10^{13}$ | k | c | A Мэв |
|-------------------|------|-----|---------|
| 1 | 0,45 | 3,1 | 100 |
| 2 | 0,91 | 3,7 | 36 |
| 4,4 | 2,02 | 5,1 | 14 |

10. Среднее значение энергии E в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$, дается следующим выражением:

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int (\nabla\psi)^2 d\tau + \int U\psi^2 d\tau.$$

Согласно вариационному принципу, величина E принимает значение энергии основного состояния, если ψ — точная функция основного состояния. Если же в качестве ψ взять определенные функции, зависящие от одного или нескольких

параметров α, β, \dots , то энергия E будет функцией этих параметров $E(\alpha, \beta, \dots)$ и наилучшее приближение к энергии и ψ -функции основного состояния будет достигнуто для значений $\alpha = \alpha_0, \beta = \beta_0, \dots$, удовлетворяющих условиям

$$\left(\frac{\partial E(\alpha, \beta, \dots)}{\partial \alpha} \right)_{\substack{\alpha = \alpha_0 \\ \beta = \beta_0 \\ \dots}} = 0; \quad \left(\frac{\partial E(\alpha, \beta, \dots)}{\partial \beta} \right)_{\substack{\alpha = \alpha_0 \\ \beta = \beta_0 \\ \dots}} = 0, \dots$$

При этом величина $E(\alpha_0, \beta_0, \dots)$ всегда превышает энергию основного состояния и тем ближе к ней, чем шире и целесообразнее выбран класс допустимых функций.

В нашем случае $\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} R(r)$, где $R(r) = ce^{\frac{-\alpha r}{2a}}$. Из условия нормировки следует $c^2 = \frac{\alpha^3}{2a^3}$, так что

$$\begin{aligned} E(\alpha) &= c^2 \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty \left(\frac{\alpha}{2a} \right)^2 e^{-\frac{\alpha r}{a}} r^2 dr - c^2 A \int_0^\infty e^{-\frac{\alpha r}{a}} \frac{r}{a} r^2 dr = \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\alpha}{2a} \right)^2 - A \left(\frac{\alpha}{\alpha + 1} \right)^3. \end{aligned}$$

Находим минимум $E(\alpha)$:

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu a^2} - \frac{3A\alpha^2}{(\alpha + 1)^4} = 0.$$

Откуда

$$\frac{(\alpha_0 + 1)^4}{\alpha_0} = \frac{12A\mu a^2}{\hbar^2} = 22,3; \quad \alpha_0 = 1,34.$$

Величина энергии при этом значении параметра

$$E = -2,14 \text{ Мэв.}$$

Точное решение этой задачи приводит для указанных величин A и a к значению $E = -2,2 \text{ Мэв}$ (ср. предыдущую задачу).

11. Уравнение для радиальной части волновой функции при $r < a$ имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + k^2 R = 0, \quad (1)$$

где

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

при $r = a$, $R = 0$.

Введем вместо R новую искомую функцию $\chi(r)$ по формуле

$$\frac{\chi(r)}{\sqrt{r}} = R(r).$$

Подставляя в уравнение (1), мы получим для $\chi(r)$ уравнение

$$\chi'' + \frac{1}{r} \chi' + \left\{ k^2 - \frac{(l + 1/2)^2}{r^2} \right\} \chi = 0,$$

решением которого являются функции Бесселя полуцелого порядка:

$$\chi(r) = J_{l+1/2}(kr),$$

$$R(r) = \frac{c}{\sqrt{r}} J_{l+1/2}(kr).$$

Значения энергии $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$ стационарных состояний определяется из условия обращения в нуль функции Бесселя при $r = a$

$$J_{l+1/2}(ka) = 0,$$

а c — из условия нормировки.

Наиболее просто определить уровни энергии для частицы с моментом $l = 0$. В этом случае

$$J_{1/2}(kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin kr$$

и энергия

$$E_{n0} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{n^2 \pi^2}{a^2}.$$

12. Задача сводится к решению одномерной задачи с потенциалом

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

Полагая в задаче 4 § 1 $U_1 = \infty$, $U_2 = U_0$, получаем уравнение, определяющее уровни энергии в дискретном спектре

$$ka = n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

Уровни энергии легко найти с помощью графического построения (см. рис. 24).

Глубина ямы, при которой появляется первый дискретный уровень, равна

$$U_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

13. При «закруглении» краев ямы все уровни сместятся вверх, т. е. $\Delta E > 0$. Состояниям с большими l соответствуют большие смещения уровней, так как частицы, находящиеся в состоянии с большими моментами количества движения, проводят относительно большую долю времени вблизи края ямы.

14. Радиальная волновая функция удовлетворяет уравнению

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - U)\chi = 0.$$

В области I, где $U = 0$, решение, обращающееся в нуль при $r = 0$

$$\chi = A \sin kr, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}.$$

В области II ($U = U_0$) общее решение имеет вид

$$\chi = B_+ e^{\kappa(r-r_1)} + B_- e^{-\kappa(r-r_1)}, \quad \kappa^2 = \frac{2\mu(U_0 - E)}{\hbar^2}.$$

Коэффициенты B_+ и B_- определяются из условия непрерывности χ и χ' на границе областей I и II:

$$\begin{aligned} A \sin kr_1 &= B_+ + B_-, \\ Ak \cos kr_1 &= \kappa(B_+ - B_-). \end{aligned}$$

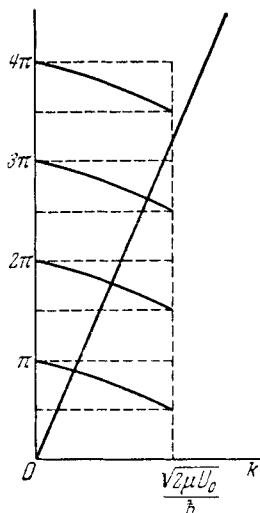


Рис. 24.

Откуда

$$\left. \begin{aligned} B_+ &= \frac{A}{2} \left(\sin kr_1 + \frac{k}{\alpha} \cos kr_1 \right), \\ B_- &= \frac{A}{2} \left(\sin kr_1 - \frac{k}{\alpha} \cos kr_1 \right). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Решение в области III, где снова $U = 0$

$$\chi = C_+ e^{ik(r-r_2)} + C_- e^{-ik(r-r_2)}.$$

Условия непрерывности на границе областей II и III дают:

$$\begin{aligned} B_+ e^{\alpha(r_2-r_1)} + B_- e^{-\alpha(r_2-r_1)} &= C_+ + C_-, \\ \alpha(B_+ e^{\alpha(r_2-r_1)} - B_- e^{-\alpha(r_2-r_1)}) &= ik(C_+ - C_-). \end{aligned}$$

Отсюда находим

$$\begin{aligned} C_+ &= \frac{1}{2} B_+ \left(1 + \frac{\alpha}{ik} \right) e^{\alpha(r_2-r_1)} + \frac{1}{2} B_- \left(1 - \frac{\alpha}{ik} \right) e^{-\alpha(r_2-r_1)}, \\ C_- &= \frac{1}{2} B_+ \left(1 - \frac{\alpha}{ik} \right) e^{\alpha(r_2-r_1)} + \frac{1}{2} B_- \left(1 + \frac{\alpha}{ik} \right) e^{-\alpha(r_2-r_1)}. \end{aligned}$$

Выразим C_+ и C_- через A с помощью (1):

$$\begin{aligned} C_+ &= \frac{1}{4} A \sin kr_1 \left(1 + \frac{\alpha}{ik} \right) e^{\alpha(r_2-r_1)} \left\{ 1 + \frac{1 - \frac{\alpha}{ik}}{1 + \frac{\alpha}{ik}} e^{-2\alpha(r_2-r_1)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k}{\alpha} \operatorname{ctg} kr_1 \left[1 - \frac{1 - \frac{\alpha}{ik}}{1 + \frac{\alpha}{ik}} e^{-2\alpha(r_2-r_1)} \right] \right\}. \quad (2) \end{aligned}$$

Выражения (1) и (2) определяют вид стационарной волновой функции частицы. Поведение волновой функции существенно зависит от энергии частицы. Рассмотрим зависимость C_+ и C_- от энергии. Будем предполагать, что величина $\alpha(r_2 - r_1) \gg 1$. Тогда всеми членами, содержащими множитель $e^{-2\alpha(r_2-r_1)}$, можно пренебречь и

$$C_+ \approx \frac{A}{4} \sin kr_1 \left(1 + \frac{\alpha}{ik} \right) e^{\alpha(r_2-r_1)} \left\{ 1 + \frac{k}{\alpha} \operatorname{ctg} kr_1 \right\}, \quad C_- = C_+^*.$$

Таким образом, если величина в фигурной скобке не слишком мала, коэффициенты C_+ и C_- значительно превышают A , т. е. волновая функция заметно отлична от нуля только

в области III (рис. 25, а). При некоторых значениях энергии, когда выражение в фигурной скобке (2) мало, C_+ и C_- могут принять anomalно малые значения. Такие энергии

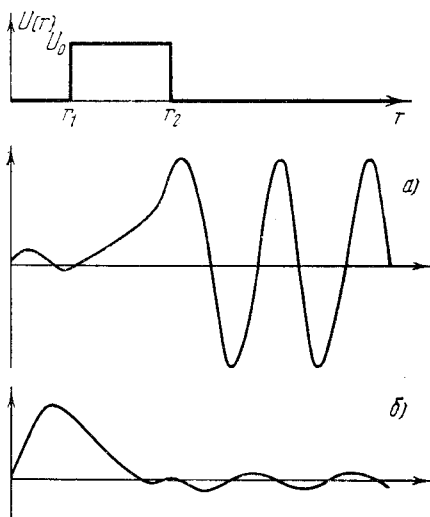


Рис. 25.

лежат вблизи значений E_n , определяемых из трансцендентного уравнения

$$1 + \sqrt{\frac{E_n}{U_0 - E_n}} \operatorname{ctg} \sqrt{\frac{2\mu E_n}{\hbar^2}} r_1 = 0$$

и носящих название квазистационарных уровней.

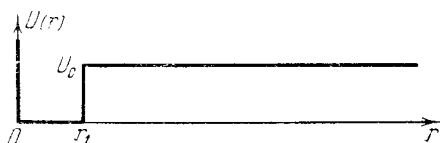


Рис. 26.

Как нетрудно заметить, значения E_n представляют истинные уровни дискретного спектра задачи с потенциалом, изображенным на рис. 26 ($r_2 \rightarrow \infty$).

Итак, значениям энергии, лежащим в узкой полосе вблизи квазиуровней, соответствуют исчезающе малые в области III волновые функции (рис. 25, б).

Для частицы, энергия которой строго определена, вероятность нахождения в области I равна нулю. В самом деле, волновая функция частицы с определенной энергией относится к непрерывному спектру и интеграл по области III от $|\psi(r, E)|^2$ расходится, в то время как интеграл по области I конечен. Это утверждение справедливо и для состояния вблизи квазиуровня. Поэтому в задаче о вероятности выхода частицы из области I надо рассмотреть состояние, представляющее суперпозицию ряда стационарных состояний близких энергий, т. е. «волновой пакет», локализованный в области I, и исследовать его «расплывание» с течением времени. В качестве волновой функции при $t=0$ возьмем функцию χ_0 , которая практически обращается в нуль в области III, а в областях I и II совпадает с волновой функцией квазистационарного уровня.

Произведем разложение $\chi_0(r)$ по стационарным волновым функциям:

$$\chi_0(r) = \int_0^{\infty} \varphi(E) \chi_E(r) dE. \quad (3)$$

Функции $\chi_E(r)$ будем считать нормированными по шкале энергии. Состояние частицы в момент времени t

$$\chi_0(r, t) = \int \varphi(E) \chi_E(r) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} dE.$$

Рассмотрим вероятность того, что частица через время t будет находиться в начальном состоянии $\chi_0(r)$

$$W(t) = \left| \int_0^{\infty} \chi_0(r) \chi_0(r, t) dr \right|^2 = \left| \int_0^{\infty} |\varphi(E)|^2 e^{-i \frac{E}{\hbar} t} dE \right|^2. \quad (4)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению распределения по энергии начального состояния $|\varphi(E)|^2$.

Из уравнения (3) следует:

$$\varphi(E) = \int_0^{\infty} \chi_0(r) \chi_E(r) dr. \quad (5)$$

В соответствии со сказанным, в качестве $\chi_0(r)$ можно принять собственную функцию вспомогательной задачи с потенциалом, изображенным на рис. 26 при $r < r_1$

$$\chi_0(r) = a \sin k_0 r \quad \left(k_0^2 = \frac{2\mu E_0}{\hbar^2} \right)$$

и при $r > r_1$

$$\chi_0(r) = -\frac{k_0}{\alpha_0} a e^{-2\alpha(r-r_1)}, \quad \alpha^2 = \alpha_0^2 - k_0^2.$$

Значение k_0 определяется условием

$$\sin k_0 r_1 = -\frac{k_0}{\alpha_0}, \quad \cos k_0 r_1 = \frac{\alpha}{\alpha_0},$$

а нормировочная постоянная $a = \sqrt{\frac{2\alpha}{1 + \alpha r_1}}$.

Функции $\chi_E(r)$ в областях I, II и III были определены лишь с точностью до общего постоянного множителя A . Теперь надо выбрать A так, чтобы $\chi_E(r)$ были нормированы по шкале энергий. Асимптотический вид $\chi_E(r)$ определяется значениями коэффициентов C_+ и C_- . Нормировка

$$\int_0^{\infty} \chi_E(r) \chi_{E'}^*(r) dr = \delta(E - E')$$

дает

$$|C_+| = |C_-| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi k}}.$$

Отсюда с помощью (2) можно определить зависимость A от

энергии. Раньше отмечалось, что отношение $\frac{|C_{\pm}|}{A(E)} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi k}}$

велико почти для всех значений энергии и мало лишь тогда, когда E близко к одному из квазиуровней. Поэтому $\varphi(E)$

имеет один резкий максимум вблизи $E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu}$. В области

других квазиуровней, хотя $A(E)$ и возрастает снова, но интеграл в (5) будет близок к нулю вследствие почти полной ортогональности $\chi_0(r)$ к собственным функциям $\chi_E(r)$, относящимся к другим квазиуровням. Итак, в выражении (4) для вероятности $W(t)$ существенна область значений E , близких к E_0 .

После этого предварительного рассмотрения приступим к вычислению $\varphi(E)$. Прежде всего найдем зависимость A от E . Из выражений (2) для C_+ и C_- следует:

$$C_+ = C_-^* = \frac{1}{2} B_+ \left(1 + \frac{x}{ik}\right) e^{x(r_2-r_1)} + \frac{1}{2} B_- \left(1 - \frac{x}{ik}\right) e^{-x(r_2-r_1)}.$$

Кроме того, B_+ и B_- выражаются через A :

$$B_+ = \frac{A}{2} \left(\sin kr_1 + \frac{k}{x} \cos kr_1 \right),$$

$$B_- = \frac{A}{2} \left(\sin kr_1 - \frac{k}{x} \cos kr_1 \right).$$

Вблизи квазиуровня можно положить $k - k_0 = \Delta k$ и считать, что выполняются неравенства

$$|\Delta k| \ll k_0 \text{ и } |\Delta k| \ll x. \quad (6)$$

При этом главные члены в B_+ и B_-

$$B_+ = \frac{A}{2} \frac{x_0}{x^2} (1 + xr_1) \Delta k,$$

$$B_- = -A \frac{k_0}{x_0}.$$

Предполагая, что $e^{-x(r_2-r_1)} \ll 1$, находим:

$$|C_{\pm}| = \frac{A}{4} \frac{x_0^2}{kx^2} (1 + xr_1) e^{x(r_2-r_1)} \times \\ \times \sqrt{(\Delta k)^2 + \left(\frac{4x^3}{x_0^4} \cdot \frac{k^2}{1 + xr_1} e^{-2x(r_2-r_1)} \right)^2}$$

и так как $|C_+| = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi k}}$, получаем:

$$A(E) = \frac{\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2\pi k}} \frac{4kx^2}{x_0^2 (1 + xr_1)} e^{-x(r_2-r_1)}}{\sqrt{(\Delta k)^2 + \left(\frac{4x^3}{x_0^4} \cdot \frac{k^2}{1 + xr_1} e^{-2x(r_2-r_1)} \right)^2}}.$$

Теперь интеграл (5), определяющий $\varphi(E)$, может быть легко вычислен, если считать, что по-прежнему справедливы неравенства (6). Функция $\chi_E(r)$ в области I и II мало отли-

чается от $\frac{A(E)}{a} \chi_0$, область III вообще не существенна для нахождения $\varphi(E)$, так как $\chi_0(r)$ экспоненциально спадает при $r > r_1$.

Таким образом,

$$\varphi(E) = \frac{A(E)}{a} \int_0^{\infty} \chi_0^2(r) dr = \frac{A(E)}{a}.$$

В результате простых преобразований находим

$$\varphi^2(E) = \frac{\hbar}{2\pi\tau} \frac{1}{(E - E_0)^2 + \frac{\hbar^2}{4\tau^2}},$$

где

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2}{\mu} k_0 \Delta k$$

и

$$\tau = \frac{\mu}{8\hbar} \frac{\chi_0^4}{\chi^3 k^3} e^{2\alpha(r_2 - r_1)} (1 + \alpha r_1).$$

Выполняя интегрирование в (4), находим закон распада

$$W(t) = e^{-\frac{t}{\tau}}.$$

Вероятность того, что частица осталась в начальном состоянии внутри барьера $W(t)$, уменьшается в e раз через промежуток времени

$$\tau = \frac{1}{16} \frac{\hbar}{U_0} \left(\frac{U_0^2}{E(U_0 - E)} \right)^{3/2} e^{2\alpha(r_2 - r_1)} (1 + \alpha r_1).$$

§ 6. ДВИЖЕНИЕ ЧАСТИЦЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

1. В однородном магнитном поле электрон, рассматриваемый согласно классической механике, движется по винтовой линии, ось которой направлена вдоль магнитного поля. Движение в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, происходит с частотой, равной удвоенной частоте Лармора ($\omega = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c}$). Рассмотрим движение волнового пакета на основании квантовой механики. Уравнение Шредингера

для частицы в магнитном поле можно записать в следующем виде:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi + \frac{\hbar}{i} \omega \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \mu \omega^2 (x^2 + y^2) \Psi.$$

Чтобы найти решение задачи, удобно перейти к вращающейся системе координат

$$\left. \begin{aligned} x &= x' \cos \omega t' - y' \sin \omega t', \\ y &= x' \sin \omega t' + y' \cos \omega t', \\ z &= z', \\ t &= t', \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi'(x', y', z', t').$$

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t} + \omega \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \Delta' = \Delta.$$

Уравнение Шредингера в новых переменных принимает следующую форму:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta' \Psi' + \frac{\mu \omega^2}{2} (x'^2 + y'^2) \Psi'.$$

Решение этого уравнения может быть получено разделением переменных x' , y' , z' . Уравнение для функции $\varphi(z')$ описывает свободное движение вдоль оси z . Решение уравнения, определяющее функцию $\psi(x, y, t)$, имеет вид

$$\psi(x, y, t) = \sum A_{nm} \chi_n \left(x' \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}} \right) \chi_m \left(y' \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}} \right) e^{-i\omega t (n+m+1)}.$$

Здесь x' и y' — функции координат x , y и времени, определяемые из (1), χ_n — собственные функции гармонического осциллятора, A_{nm} — коэффициенты, подобранные так, чтобы выполнялось начальное условие. Это выражение для $\psi(x, y, t)$ меняет лишь знак, если t возрастает на период классического движения $T = \frac{\pi}{\omega}$. Действительно, x' и y' при этом меняют знак и, учитывая свойство собственной функции осциллятора

$$\chi_n(-\xi) = (-1)^n \chi_n(\xi),$$

получим:

$$\begin{aligned} \psi\left(x, y, t + \frac{\pi}{\omega}\right) &= \\ &= \sum A_{nm} (-1)^n \chi_n\left(x' \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right) (-1)^m \chi_m\left(y' \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right) \times \\ &\quad \times e^{-i\omega t(n+m+1)} e^{-i\pi(n+m+1)} = -\psi(x, y, t). \end{aligned}$$

Таким образом, в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, волновой пакет будет периодически изменять свою форму с периодом, равным периоду классического движения частицы в магнитном поле. В направлении магнитного поля пакет расплывается точно так же, как и для свободного движения. Волновая функция $\psi(x, y, t)$ может быть найдена в явном виде, если начальная функция задана в форме

$$\psi(x, y, 0) = e^{-\frac{\alpha^2}{2} [(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2]} + \frac{ip_{0x}}{\hbar} x + \frac{ip_{0y}}{\hbar} y.$$

Полагая все $A_{nm} = 0$, за исключением $A_{00} = 1$, находим, что такой волновой пакет не расплывается в плоскости x, y , а его центр тяжести описывает классическую траекторию.

2. Для нахождения оператора $\hat{\mathcal{H}}$ надо прокоммутировать вектор \mathbf{r} с гамильтонианом

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{l}{\hbar} (\hat{H}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{H});$$

так как

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

то находим:

$$\mu \hat{\mathcal{H}} = \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right).$$

Теперь найдем правила коммутации этих операторов

$$\begin{aligned} \hat{v}_x \hat{v}_y - \hat{v}_y \hat{v}_x &= \frac{e}{\mu^2 c} [-(\hat{p}_x A_y - A_y \hat{p}_x) + (\hat{p}_y A_x - A_x \hat{p}_y)] = \\ &= \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \mathcal{H}_z. \end{aligned}$$

Путем циклической перестановки получаем остальные два соотношения.

3. Направим ось z по направлению магнитного поля, напряженность которого обозначим через \mathcal{H} .

Компоненты скорости частицы удовлетворяют следующим правилам коммутации (см. задачу 2 § 6):

$$\hat{v}_x \hat{v}_y - \hat{v}_y \hat{v}_x = \frac{ie\hbar}{\mu^2 c} \mathcal{H}, \quad \hat{v}_y \hat{v}_z - \hat{v}_z \hat{v}_y = 0, \quad \hat{v}_z \hat{v}_x - \hat{v}_x \hat{v}_z = 0.$$

Оператор энергии равен

$$\hat{H} = \frac{\mu \hat{v}_x^2}{2} + \frac{\mu \hat{v}_y^2}{2} + \frac{\mu \hat{v}_z^2}{2}.$$

Представим H в виде суммы двух коммутирующих операторов

$$\hat{H}_1 = \frac{\mu \hat{v}_x^2}{2} + \frac{\mu \hat{v}_y^2}{2}, \quad \hat{H}_2 = \frac{\mu \hat{v}_z^2}{2}.$$

Собственные значения \hat{H} равны сумме собственных значений \hat{H}_1 и \hat{H}_2 . Найдем собственные значения \hat{H}_1 . Для этого введем новые обозначения $\hat{v}_x = \alpha \hat{Q}$, $\hat{v}_y = \alpha \hat{P}$, где $\alpha = \sqrt{\frac{e\hbar \mathcal{H}}{\mu^2 c}}$. В переменных \hat{P} , \hat{Q} правило коммутации имеет вид $\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P} = -i$, а оператор $\hat{H}_1 = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \times \times (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2)$. На основании задачи 5 § 1 собственные значения \hat{H}_1

$$E_{1n} = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} (n + 1/2) \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Собственные значения \hat{H}_2 образуют непрерывный спектр. Итак, энергия движения в магнитном поле

$$E_{nvz} = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} (n + 1/2) + \frac{\mu v_z^2}{2}.$$

4. Направим ось z по направлению магнитного поля, а ось x вдоль электрического поля. Векторный потенциал магнитного поля возьмем в виде $A_y = \mathcal{H}x$, $A_x = A_z = 0$. Оператор Гамильтона в этом случае запишется следующим образом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}x\right)^2}{2\mu} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - e\mathcal{E}x.$$

Вводя обозначение

$$\frac{e\mathcal{H}}{c} x - \hat{p}_y - \frac{\mu c \mathcal{G}}{\mathcal{H}} = \hat{\pi},$$

получим для \hat{H} выражение

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{\pi}^2}{2\mu} - \frac{\hat{p}_y c \mathcal{G}}{\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{G}^2}{2\mathcal{H}^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}.$$

Соотношение коммутации между \hat{p}_x и $\hat{\pi}$

$$\hat{p}_x \hat{\pi} - \hat{\pi} \hat{p}_x = -i \frac{\hbar e \mathcal{H}}{c}.$$

Отсюда находим, что собственные значения оператора

$\hat{H}_1 = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\hat{\pi}^2}{2\mu}$ совпадают с уровнями энергии осциллятора, колеблющегося с удвоенной частотой Лармора

$$E_{1n} = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} (n + 1/2).$$

Поскольку операторы \hat{p}_y и \hat{p}_z , входящие в последние слагаемые оператора Гамильтона, коммутируют с \hat{H}_1 , оператор

$\hat{H}_2 = \frac{\hat{p}_z^2}{2\mu} - \frac{\hat{p}_y c \mathcal{G}}{\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{G}^2}{2\mathcal{H}^2}$ может быть приведен одновременно с \hat{H}_1 к диагональному виду.

Итак, энергетический спектр частицы

$$E_{n p_y p_z} = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{\mu c} (n + 1/2) + \frac{p_z^2}{2\mu} - \frac{p_y c \mathcal{G}}{\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{G}^2}{2\mathcal{H}^2}.$$

Сравнение с результатом предыдущей задачи показывает, что электрическое поле снимает вырождение, которое имеет место в случае одного только магнитного поля: энергетические уровни при наличии электрического поля зависят от трех квантовых чисел.

Б. $\psi_{n p_y p_z}(x, y, z) =$

$$= e^{\frac{i}{\hbar} (p_y y + p_z z)} e^{-\frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c} \left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}} - \frac{\mu c^2 \mathcal{G}}{e\mathcal{H}^2} \right)^2} \times \\ \times H_n \left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{c\hbar}} \left(x - \frac{c p_y}{e\mathcal{H}} - \frac{\mu c \mathcal{G}}{e\mathcal{H}^2} \right) \right].$$

6.

$$E_{nmk} = \hbar \sqrt{\omega^2 + \omega_0^2} (2n + |m| + 1) + \hbar \omega m + \hbar \omega_0 (k + 1/2),$$

где

$$\omega = \frac{e\mathcal{H}}{2\mu c} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ k = 0, 1, 2, \dots).$$

7.

$$\hat{x}(t) = \left(\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2} \right) \cos \omega t + \\ + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2} \right) \sin \omega t + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{2} \right), \\ \hat{y}(t) = \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{x}{2} \right) \sin \omega t + \\ + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2} \right) \cos \omega t + \left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2} \right).$$

Здесь $\omega = \frac{eH}{\mu c}$ (удвоенная частота прецессии Лармора).

8. Уравнение Шредингера в цилиндрических координатах ρ, φ, z имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} = \frac{ie\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8\mu c^2} \rho^2 \psi = E\psi.$$

Решение ищем в форме

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R(\rho) e^{ik_z z} e^{im\varphi}.$$

Обозначим через γ и β величины

$$\gamma = \frac{e\mathcal{H}}{2c\hbar}, \quad \beta = \frac{2\mu E}{\hbar^2} - k_z^2.$$

В уравнение, определяющее радиальную функцию $R(\rho)$,

$$R'' + \frac{1}{\rho} R' + \left(\beta - \gamma^2 \rho^2 - 2\gamma m - \frac{m^2}{\rho^2} \right) R = 0$$

введем новую независимую переменную $\xi = \gamma \rho^2$, тогда

$$\xi R'' + R' + \left(-\frac{\xi}{4} + \lambda - \frac{m^2}{4\xi} \right) R = 0, \quad (1)$$

где $\lambda = \frac{\beta}{4\gamma} - \frac{m}{2}$.

Искомая функция при $\xi \rightarrow \infty$ ведет себя как $e^{-\xi/2}$, а при малых ξ пропорциональна $\xi^{|m|/2}$. Решение дифференциального уравнения (1) ищем в виде

$$R = e^{-\xi/2} \xi^{|m|/2} \omega(\xi).$$

$\omega(\xi)$ находится из уравнения

$$\xi \omega'' + (1 + |m| - \xi) \omega' + \left(\lambda - \frac{|m| + 1}{2} \right) \omega = 0,$$

решение которого представляет вырожденную гипергеометрическую функцию

$$\omega = F \left\{ - \left(\lambda - \frac{|m| + 1}{2} \right), |m| + 1, \xi \right\}.$$

Для того чтобы волновая функция была конечна, величина $\lambda - \frac{|m| + 1}{2}$ должна равняться целому неотрицательному числу n . Таким образом, уровни энергии определяются выражением

$$E = h \frac{e \mathcal{H} \mathcal{C}}{\mu c} \left(n + \frac{|m|}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu}.$$

9. В цилиндрических координатах

$$J_\rho = 0,$$

$$J_\varphi = \left(\frac{e \hbar m}{\mu \rho} - \frac{e^2 \mathcal{H} \mathcal{C}}{2\mu c} \rho \right) |\psi_{nmk_z}|^2,$$

$$J_z = \frac{e \hbar k_z}{\mu} |\psi_{nmk_z}|^2.$$

10. Уравнение для радиальной волновой функции R подстановкой $u = \sqrt{\rho} R$ приводится к виду

$$u'' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} E - k_z^2 - \frac{1}{\rho^2} \left(m + \frac{e \mathcal{H} \mathcal{C}}{2\hbar c} \rho^2 \right)^2 \right] u = 0,$$

при этом $m^2 - \frac{1}{4}$ заменяется на m^2 *). Выражение

$$U_{\text{эфф}}(\rho) = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} \left(m + \frac{e \mathcal{H} \mathcal{C}}{2\hbar c} \rho^2 \right)^2$$

*) Эта замена аналогична замене $l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$ и может быть обоснована способом, указанным при решении задачи 2 § 5.

можно рассматривать как эффективную потенциальную энергию при одномерном движении.

Из условия квантования

$$\int_{\rho_1}^{\rho_2} \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2} E - k_z^2 - \frac{1}{\rho^2} \left(m + \frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c} \rho^2 \right)^2} d\rho = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

получаем энергетический спектр:

$$E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2\mu} = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{\mu c} \left(n + \frac{|m|}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right).$$

Энергия, отсчитываемая от минимума $U_{\text{эфф}}(\rho)$

$$E' = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{\mu c} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

представляет собою энергию радиального движения, а энергия

$$E'' = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} (m + |m|)$$

соответствует энергии вращательного движения. Переход к классическим круговым орбитам осуществляется при выполнении условия $E' \ll E''$ или $n \ll \frac{m + |m|}{2}$. Это условие, очевидно, выполняется лишь при положительных m и поэтому может быть записано в виде $n \ll m$.

11. Приравняв нулю подкоренное выражение, получаем для $m > 0$

$$\rho_{1,2} = \sqrt{\frac{2\hbar c}{e\mathcal{H}}} \left(\sqrt{n + m + \frac{1}{2}} \pm \sqrt{n + \frac{1}{2}} \right).$$

12.

$$\Delta\rho \sim \sqrt{\frac{\hbar c}{e\mathcal{H}}}.$$

14. Уравнение Паули имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hat{H}_0 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \mu_0 (\hat{\sigma} \mathcal{H}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

где $\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + eU$, а μ_0 — магнитный момент частицы. Будем искать волновую функцию в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varphi(x, y, z, t) \begin{pmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{pmatrix}.$$

Здесь функция φ является решением уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}_0 \varphi.$$

Тогда для спиновой функции $\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$ получаем уравнение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = -\mu_0 (\hat{\sigma} \mathcal{H}) \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}.$$

15. Поскольку $\mathcal{H}_x = \mathcal{H}_y = 0$, $\mathcal{H}_z = \mathcal{H}(t)$, имеем:

$$i\hbar \frac{\partial s_1}{\partial t} = -\mu_0 \mathcal{H}(t) s_1,$$

$$i\hbar \frac{\partial s_2}{\partial t} = \mu_0 \mathcal{H}(t) s_2.$$

Решения этих уравнений имеют вид

$$s_1 = c_1 e^{\frac{i\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt},$$

$$s_2 = c_2 e^{-\frac{i\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt}.$$

Постоянные c_1 и c_2 находим из начальных условий: $c_1 = e^{-i\alpha} \cos \delta$, $c_2 = e^{i\alpha} \sin \delta$. Из вида функции s_1 и s_2 следует, что вероятность той или иной ориентации спина на ось z не меняется со временем. Среднее значение проекции спина на ось x определяется выражением

$$\overline{s_x} = \frac{\hbar}{2} \sin 2\delta \cdot \cos \left\{ \frac{2\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt - 2\alpha \right\}$$

и аналогично этому

$$\overline{s_y} = -\frac{\hbar}{2} \sin 2\delta \cdot \sin \left\{ \frac{2\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt - 2\alpha \right\}.$$

Направление, вдоль которого проекция спина имеет значение $+1/2$, характеризуется полярными координатами $\Theta = 2\delta$,

$\Phi = 2\left(\alpha - \frac{\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt\right)$. Таким образом, это направление

описывает с течением времени коническую поверхность. При постоянной напряженности поля прямая, «вдоль которой направлен спин», равномерно вращается вокруг направления магнитного поля с частотой $\frac{2\mu_0 \mathcal{H}}{\hbar}$.

16. Состояние с произвольной поляризацией падающего пучка всегда может быть представлено как суперпозиция двух состояний, в одном из которых $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ спин направлен вдоль оси z , а в другом $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ в противоположном направлении. Рассмотрим сначала случай, когда спины нейтронов в падающем пучке направлены по оси z . Тогда падающая, отраженная и преломленная волны будут иметь вид

$$A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikr}, \quad B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_1 r}, \quad C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_2 r}.$$

Величины k , k_1 , k_2 связаны с полной энергией E и магнитным моментом μ_0 нейтрона соотношениями:

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E, \quad \frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} = E, \quad \frac{\hbar^2 k_2^2}{2\mu} = E + \mu_0 \mathcal{H}.$$

Из условия непрерывности на плоскости раздела ($x=0$) волновой функции и ее производной по x следует:

$$k_y = k_{1y} = k_{2y}, \quad k_z = k_{1z} = k_{2z}, \\ A + B = C, \\ k_x A + k_{1x} B = k_{2x} C.$$

Из этих соотношений вытекает, что $k_{1x} = -k_x$, т. е. угол падения φ равен углу отражения φ_1 . Положим для простоты $k_y = 0$. Решая уравнения, находим:

$$\left(\frac{B}{A}\right) = \frac{k_x - k_{2x}}{k_x + k_{2x}}, \quad \left(\frac{C}{A}\right) = \frac{2k_x}{k_x + k_{2x}}, \\ k_{2x} = k_x \sqrt{1 + \frac{2\mu}{\hbar^2 k_x^2} \mu_0 \mathcal{H}}.$$

Таким образом, коэффициент отражения R равен

$$R = \left(\frac{B}{A}\right)^2 = \left(\frac{k_x - k_{2x}}{k_x + k_{2x}}\right)^2.$$

Если спины нейтронов ориентированы в -противоположном осе z направлении, то в этом случае

$$k_{2x} = k_x \sqrt{1 - \frac{2\mu}{\hbar^2 k_x^2} \mu_0 \mathcal{H}},$$

а в остальном результаты будут те же. Так как μ_0 для нейтрона отрицательно, то угол преломления $\varphi_{2\uparrow} > \varphi > \varphi_{2\downarrow}$ (см. рис. 27).

В случае произвольной ориентации спина нейтронов волновая функция в области $x > 0$ будет иметь вид

$$C_{\uparrow} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_{\uparrow} r} + C_{\downarrow} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_{\downarrow} r},$$

где C_{\uparrow} и C_{\downarrow} — коэффициенты разложения начального спинового состояния по состояниям $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Простая оценка показывает, что даже при $\mathcal{H} \sim 10^4$ заметное отражение будет иметь место только для очень медленных (тепловых) нейтронов ($\lambda \sim 1 \text{ \AA}$) и при угле падения φ , отличающемся от $\frac{\pi}{2}$ на доли градуса.

17. Уравнение Шредингера для спиновой функции в z -представлении $\begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} \mathcal{H}_z & \mathcal{H}_x - i\mathcal{H}_y \\ \mathcal{H}_x + i\mathcal{H}_y & -\mathcal{H}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}$$

(здесь μ — магнитный момент частицы).

Введем обозначения

$$\frac{\mu}{\hbar} \mathcal{H} \cos \vartheta = a, \quad \frac{\mu}{\hbar} \mathcal{H} \sin \vartheta = b.$$

В новых обозначениях уравнения, определяющие компоненты s_1 и s_2 , примут форму

$$\frac{ds_1}{dt} = ias_1 + ibe^{-i\omega t}s_2,$$

$$\frac{ds_2}{dt} = ibe^{i\omega t}s_1 - ias_2.$$

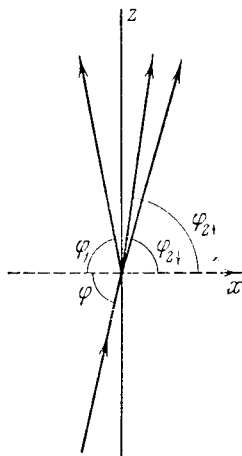


Рис. 27.

Решение этой системы уравнений:

$$s_1 = Ae^{ip_1 t} + Be^{ip_2 t},$$

$$s_2 = e^{i\omega t} \left[\frac{-a + p_1}{b} Ae^{ip_1 t} + \frac{-a + p_2}{b} Be^{ip_2 t} \right],$$

где

$$p_1 = \sqrt{\frac{\omega^2}{4} + a^2 + b^2 + \omega a} - \frac{\omega}{2},$$

$$p_2 = -\sqrt{\frac{\omega^2}{4} + a^2 + b^2 + \omega a} - \frac{\omega}{2}.$$

Величины A и B определяются из начальных условий и условия нормировки $|s_1|^2 + |s_2|^2 = 1$.

Пределав несложные вычисления, получаем для вероятности перехода следующие значения:

$$P\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{\sin^2 \vartheta}{1 + q^2 - 2q \cos \vartheta} \sin^2 \left[\frac{t}{2} \omega (1 - 2q \cos \vartheta + q^2)^{1/2} \right],$$

где q есть отношение частоты ларморовской прецессии к частоте ω вращающегося магнитного поля

$$q = -\frac{2\mu \mathcal{H}}{\hbar \omega} = \frac{\omega_0}{\omega}.$$

Величина q положительна, если магнитное поле вращается в направлении прецессии, и отрицательна, если вращение происходит в обратном направлении.

Если угол ϑ мал, т. е. $\frac{\sqrt{\mathcal{H}_x^2 + \mathcal{H}_y^2}}{\mathcal{H}_z} \ll 1$, то вероятность перехода приближенно равна

$$P\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{\vartheta^2}{(1 - q)^2 + q\vartheta^2} \sin^2 \left[\frac{t}{2} \omega [(1 - q)^2 + q\vartheta^2]^{1/2} \right].$$

Из этой формулы следует, что при резонансном соотношении $\omega = \omega_0$, т. е. при $q = +1$ вероятность переориентации магнитного момента относительно магнитного поля, равная $P\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \approx \sin^2 \frac{t\omega}{2} \vartheta$, может оказаться близкой к единице при некотором значении t .

Если же в рассматриваемом случае изменить направление вращения магнитного поля (или изменить знак у \mathcal{H}_z), то

для вероятности перехода получим величину

$$P\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) = \frac{\mu^2}{4} \sin^2 \omega t,$$

значительно меньшую единицы. На основании такого резкого качественного различия можно определить знак магнитного момента частицы

$$18. \text{ а) } \hat{x}(t) = \frac{\hat{p}_x}{m} t + x, \quad \hat{y}(t) = -\frac{\mu k}{2m} t^2 \hat{\sigma}_y + \frac{\hat{p}_y}{m} t + y, \\ \hat{z}(t) = \frac{\mu k}{2m} t^2 \hat{\sigma}_z + \frac{\hat{p}_z}{m} t + z.$$

$$\text{б) } \overline{\hat{z}(t)} = (\bar{z})_0 + \frac{\mu k}{2m} t^2 (\alpha\alpha^* - \beta\beta^*),$$

$$\overline{\hat{y}(t)} = (\bar{y})_0 - \frac{\mu k}{2m} t^2 (i\beta^*\alpha - i\beta\alpha^*),$$

$$\overline{\hat{x}(t)} = (\bar{x})_0 + \frac{p_0}{m} t,$$

$$\overline{(\hat{\Delta z})_t^2} = \overline{(\Delta z)_0^2} + \frac{\mu^2 k^2}{4m^2} t^4 [1 - (\alpha\alpha^* - \beta\beta^*)^2] + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \int (\frac{\partial \varphi}{\partial z})^2 d\tau,$$

$$\overline{(\hat{\Delta y})_t^2} = \overline{(\Delta y)_0^2} + \frac{\mu^2 k^2}{4m^2} t^4 [1 - (i\beta^*\alpha - i\beta\alpha^*)^2] + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \int (\frac{\partial \varphi}{\partial y})^2 d\tau,$$

$$\overline{(\hat{\Delta x})_t^2} = \overline{(\Delta x)_0^2} + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2} \int (\frac{\partial \varphi}{\partial x})^2 d\tau.$$

Замечание. Рассмотрим, например, совокупность частиц, у которых проекция спина на ось z при $t=0$ с достоверностью имеет значение $+1/2$, т. е. $\alpha=1$, $\beta=0$. Как легко видеть из полученных результатов, если на пути таких частиц, движущихся в неоднородном магнитном поле, поставить экран, то на нем этими частицами будет образовано два пятна. z -координаты этих пятен будут одинаковы, а y -е координаты противоположны по знаку.

19. Направление магнитного поля будем характеризовать полярными углами ϑ , φ . Углы ϑ и φ являются функциями времени. Оператор Гамильтона для нейтральной частицы представим в виде

$$\hat{H} = -\mu \mathcal{H} (\hat{J}_x \sin \vartheta \cos \varphi + \hat{J}_y \sin \vartheta \sin \varphi + \hat{J}_z \cos \vartheta);$$

здесь \mathcal{H} — абсолютное значение напряженности магнитного поля. Обозначим через \hat{J}_z оператор момента в направлении магнитного поля

$$\hat{J}_z = \hat{J}_x \sin \vartheta \cos \varphi + \hat{J}_y \sin \vartheta \sin \varphi + \hat{J}_z \cos \vartheta$$

и введем функции $\psi_m(t)$, которые являются собственными функциями оператора \hat{J}_z , т. е.

$$\hat{J}_z \psi_m(t) = m \psi_m(t).$$

Будем искать решение уравнения Шредингера

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

в виде

$$\psi = \sum a_m(t) \psi_m(t).$$

Как известно (см. задачу 19 § 4),

$$\psi_m(t) = e^{-i\hat{J}_z \varphi} e^{-i\hat{J}_y \vartheta} \psi_m^{(0)},$$

где $\psi_m^{(0)}$ удовлетворяет соотношению

$$\hat{J}_z \psi_m^{(0)} = m \psi_m^{(0)}.$$

Вычислим сперва $\dot{\psi}_m(t)$. Воспользовавшись соотношениями

$$e^{i\hat{J}_y \vartheta} \hat{J}_z e^{-i\hat{J}_y \vartheta} = \hat{J}_z \cos \vartheta - \hat{J}_x \sin \vartheta,$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_x \psi_m^{(0)} &= \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \psi_{m-1}^{(0)} + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \psi_{m+1}^{(0)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_y \psi_m^{(0)} &= \frac{i}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \psi_{m-1}^{(0)} - \\ &\quad - \frac{i}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} \psi_{m+1}^{(0)}, \end{aligned}$$

имеем:

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_m(t) &= (-i\dot{\varphi} m \cos \vartheta) \psi_m(t) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{(j+m+1)(j-m)} (i\dot{\varphi} \sin \vartheta - \dot{\vartheta}) \psi_{m+1}(t) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} (i\dot{\varphi} \sin \vartheta + \dot{\vartheta}) \psi_{m-1}(t). \end{aligned}$$

Подставляя значение $\dot{\psi}_m(t)$ в выражение

$$i\hbar \sum_m \{\psi_m(t) \dot{a}_m(t) + a_m(t) \dot{\psi}_m(t)\} = -\mu \mathcal{H} \sum_m m a_m(t) \psi_m(t),$$

получаем систему уравнений, определяющих изменение коэффициентов a_m во времени:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_m}{dt} + m\mu \mathcal{H} a_m &= -m\hbar \dot{\varphi} \cos \vartheta a_m + \\ &+ \frac{1}{2} \hbar (\dot{\varphi} \sin \vartheta + i\dot{\vartheta}) \sqrt{(j+m)(j-m+1)} a_{m-1} + \\ &+ \frac{1}{2} \hbar (\dot{\varphi} \sin \vartheta - i\dot{\vartheta}) \sqrt{(j-m)(j+m+1)} a_{m+1}. \end{aligned}$$

Если

$$\dot{\varphi} \ll \frac{\mu \mathcal{H}}{\hbar}, \quad \dot{\vartheta} \ll \frac{\mu \mathcal{H}}{\hbar},$$

т. е. угловая скорость изменения направления магнитного поля много меньше частоты прецессии, то в приведенной системе уравнений можно пренебречь правой частью и тогда

$$a_m \sim e^{i \frac{m\mu \mathcal{H}}{\hbar} t}.$$

Таким образом, в этом случае вероятности различных значений проекции момента на изменяющееся во времени направление магнитного поля остаются постоянными.

§ 7. АТОМ

1. Из написанного неравенства получаем:

$$\int |\nabla \psi|^2 d\tau + Z \int (\nabla |\psi|^2 \nabla r) d\tau + Z^2 \int (\nabla r)^2 |\psi|^2 d\tau \geq 0.$$

Производя во втором члене интегрирование по частям и замечая, что $(\nabla r)^2 = 1$, а $\Delta r = \frac{2}{r}$,

имеем:

$$\frac{1}{2} \int |\nabla \psi|^2 d\tau - \int \frac{Z}{r} |\psi|^2 d\tau \geq -\frac{Z^2}{2} \int |\psi|^2 d\tau.$$

Левая часть неравенства представляет среднее значение

оператора Гамильтона*) $\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r}$ в состоянии ψ . Нижнее значение энергии $-\frac{Z^2}{2}$ достигается в состоянии с волновой функцией ψ_0 , удовлетворяющей уравнению первого порядка

$$\nabla \psi_0 + Z \psi_0 \nabla r = 0,$$

откуда следует, что

$$\psi_0 \sim e^{-Zr}.$$

5. Вычисляем сначала волновые функции в импульсном представлении по общей формуле

$$\varphi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \int \int e^{-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} \psi(\mathbf{r}) d\tau.$$

Для состояния $1s$ находим:

$$\varphi_{1s}(p) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} + 1\right)^2}.$$

Аналогично этому для состояния $2s$ получаем:

$$\varphi_{2s}(p) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} - \frac{1}{4}}{\left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^3}.$$

Состоянию $2p$ соответствуют 3 собственных функции ($m_z = -1, 0, +1$)

$$\varphi_{2p}^{(0)}(p) = -i \frac{1}{\pi} \left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{p_z a}{h \left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^3},$$

$$\varphi_{2p}^{(\pm 1)}(p) = -\frac{i}{\sqrt{2}\pi} \left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{(p_x \pm i p_y) a}{h \left(\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} + \frac{1}{4}\right)^3}.$$

С помощью этих выражений находим распределение по импульсам (нормированное):

$$w(\mathbf{p}) = |\varphi(\mathbf{p})|^2.$$

$$6. \sqrt{\bar{r}^2 - r^2} = \frac{\sqrt{n^2(n^2+2) - l^2(l+1)^2}}{2}.$$

*) В единицах $e = \hbar = \mu = 1$.

При заданном n минимальное значение это выражение имеет для «круговых орбит», т. е. при $l = n - 1$

$$\sqrt{r^2 - \bar{r}^2} = \frac{1}{2} n \sqrt{2n + 1}, \quad \frac{\sqrt{r^2 - \bar{r}^2}}{r} = \frac{1}{\sqrt{2n + 1}}.$$

7. При $n_1 = 1, n_2 = 0, m = 0$

$$\begin{aligned} \psi_{1, 0, 0}(\xi, \eta, \varphi) = & -\frac{1}{\sqrt{2}} R_{20}(r) Y_{00}(\vartheta, \varphi) + \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) Y_{10}(\vartheta, \varphi). \end{aligned}$$

9. В некантовой релятивистской механике функция Гамильтона имеет вид

$$H = \sqrt{\mu^2 c^4 + p^2 c^2} - \mu c^2 + U(r) \approx \frac{p^2}{2\mu} + U(r) + H_1,$$

причем

$$H_1 = -\frac{p^4}{8\mu^3 c^2}.$$

Будем теперь считать p оператором $p = -i\hbar\nabla$, а H_1 рассмотрим как малое возмущение. Тогда в исходном приближении имеем уравнение Шредингера $\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + U(r)\right]\psi = E\psi$, а искомая поправка к энергии в состоянии n, l, m

$$\begin{aligned} \Delta E_1 = & -\frac{1}{8\mu^3 c^2} \int \psi^* \hat{p}^4 \psi d\tau = -\frac{1}{2\mu c^2} \int \psi^* (E - U(r))^2 \psi d\tau = \\ = & \frac{3E^2}{2\mu c^2} - \frac{\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right)^2}{n^3 \mu c^2 (2l + 1)} = \left[\frac{2}{8n^4} - \frac{1}{(2l + 1)n^3} \right] \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2. \end{aligned}$$

10. Вместо того чтобы исходить из невозмущенных волновых функций с определенными l_z и s_z и затем решать секулярное уравнение, удобно выбрать в качестве исходных волновых функций собственные функции с определенным \hat{l}^2 и \hat{j}^2 , где $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ — полный момент, коммутирующий, как нетрудно проверить, с H_2 . Замечая, что по классу рассматриваемых функций справедливы соотношения

$$\hat{j}^2 = j(j + 1) = l(l + 1) + s(s + 1) + 2\hat{l}\hat{s},$$

находим:

$$\Delta E_2 = \overline{H}_2 = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{4\mu^2 c^2} \hbar^2 \overline{\left(\frac{1}{r} \frac{dU}{dr}\right)}.$$

Для атома водорода $U = -\frac{e^2}{r}$ и поскольку

$$\overline{\frac{1}{r^3}} = \frac{1}{n^3(l+1)\left(l + \frac{1}{2}\right)l} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3,$$

находим окончательно:

$$\Delta E_2 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{4n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right) (l+1)}.$$

Эту формулу можно записать короче, так как в нашем случае $s = 1/2$ и возможны два случая $j = l - 1/2$ и $j = l + 1/2$. Как легко проверить, при этом

$$2ls = j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) = \begin{cases} l & \text{при } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{при } j = l - \frac{1}{2}, \end{cases}$$

так что для любых j и l

$$\Delta E_2 = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{1}{2n^3} \left(-\frac{1}{j + \frac{1}{2}} + \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right).$$

Складывая ΔE_2 с поправкой, учитывающей зависимость массы от скорости ΔE_1 (см. предыдущую задачу), получаем:

$$\Delta E = \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \frac{1}{n^3} \left(\frac{3}{8n} - \frac{1}{2j+1} \right).$$

Это выражение не зависит от l , т. е. два уровня с одинаковым j и разными l имеют одинаковую энергию (вырождены).

12. При β -распаде ядро трития превращается в ядро изотопа гелия He^3 . Влияние β -распада на атомный электрон заключается по существу в том, что за короткое время $t \ll \frac{\hbar^3}{\mu e^4}$ потенциальная энергия электрона в атоме изменяется и вместо $U = -\frac{e^2}{r}$ становится равной $U = -\frac{2e^2}{r}$. Время t

можно оценить как время пролета β -электрона через атом

$$t \sim \frac{a_0}{v},$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu c^2}$, v — скорость β -электрона. Поскольку энергия

β -электрона порядка нескольких $kэв$, находим $t \sim 0,1 \frac{\hbar^3}{\mu e^4}$.

Волновая функция электрона не успевает измениться за время t , что следует из уравнения Шредингера:

$$\delta\psi \sim \frac{e^2}{r} \frac{t}{i\hbar} \psi \ll \psi.$$

Разложим волновую функцию электрона ψ по собственным функциям электрона в поле $Z=2$.

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n + \int c_k \psi_k d\mathbf{k}.$$

Коэффициенты разложения

$$c_n = \int \psi \psi_n d\tau,$$

$$c_k = \int \psi \psi_k d\tau$$

определяют вероятность возбуждения

$$w_n = \sum |c_n|^2$$

и ионизации

$$w_{\text{ион}} = \int |c_k|^2 d\mathbf{k}.$$

Поскольку ψ — сферически-симметрична, то c_n и c_k отличны от нуля лишь в том случае, когда состояния n , k являются s -состояниями ($l=0$).

Поскольку

$$R_{n0}^{(Z)} = 2 \left(\frac{Z}{n}\right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{n}} F\left(-n+1, 2, \frac{2Zr}{n}\right),$$

находим:

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^\infty R_{n0}^{(Z)} R_{10}^{(Z')} r^2 dr = \\ &= \frac{8}{\left(Z' + \frac{Z}{n}\right)^3} \left(\frac{ZZ'}{n}\right)^{3/2} F\left(-n+1, 3, 2, \frac{2Z}{nZ' + Z}\right). \end{aligned}$$

Полагая $Z = 2$, $Z' = 1$, получаем для $n = 1$:

$$c_1 = \frac{16\sqrt{2}}{27},$$

т. е. вероятность того, что ион He^3 будет в основном состоянии $w_1 = |c_1|^2 = \left(\frac{8}{9}\right)^3 = 0,70$. Следовательно, суммарная вероятность возбуждения и ионизации будет равна $1 - w_1 = 0,30$. Для $n = 2$, $c_2 = -\frac{1}{2}$, $w_2 = 0,25$.

С помощью формулы

$$F(\alpha, \beta, \gamma, x) = (1-x)^{\gamma-\alpha-\beta} F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma, x)$$

находим:

$$w_n = |c_n|^2 = \frac{2^9 n^5 (n-2)^{2n-4}}{(n+2)^{2n+4}}.$$

Приведем значения вероятностей возбуждения, вычисленных с помощью этой формулы, для нескольких первых уровней:

$$w_1 = \left(\frac{8}{9}\right)^3, \quad w_2 = \frac{1}{4}, \quad w_3 = \frac{2^9 3^5}{5^{10}} \approx 1,30\%,$$

$$w_4 = \frac{2^{23}}{2^{12} 3^{12}} \approx 0,39\%.$$

13. Гамильтониан имеет следующий вид (все расчеты будем производить в атомных единицах $e = \hbar = \mu = 1$)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}.$$

Согласно вариационному принципу надо вычислить интеграл

$$E(Z') = \int \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{H} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\tau_1 d\tau_2$$

и определить величину Z' из условия $\frac{dE}{dZ'} = 0$.

В нашем случае

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = c e^{-Z'(r_1+r_2)},$$

причем нормировочная постоянная $c = \frac{Z'^3}{\pi}$.

Интегралы от первых четырех членов легко вычисляются

$$\int \psi(r_1, r_2) \left\{ -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \right\} \times \\ \times \psi(r_1, r_2) d\tau_1 d\tau_2 = Z'^2 - 2ZZ'.$$

Что касается интеграла с $\frac{1}{r_{12}}$, то его удобно вычислить в эллиптических координатах:

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2, \quad u = r_{12}, \\ d\tau_1 d\tau_2 = \pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du, \\ -u \leq t \leq u, \quad 0 \leq u \leq s \leq \infty.$$

В результате вычисления имеем:

$$\int \psi^2(r_1, r_2) \frac{1}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 = \\ = \pi^2 c^2 \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^+ dt e^{-2Z's} \frac{s^2 - t^2}{u} u = \frac{5}{8} Z'.$$

Окончательно получаем:

$$E(Z') = Z'^2 - 2ZZ' + \frac{5}{8} Z'.$$

Из условия минимума $E(Z')$ находим:

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

При этом значении Z' энергия основного состояния

$$E = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2.$$

Чтобы получить представление о точности проведенного расчета, вычислим ионизационный потенциал гелия ($Z = 2$) и сравним результат с экспериментальными данными. Ионизационный потенциал гелия I_{He} равняется разности энергий однократно ионизированного атома гелия и нейтрального атома гелия в основном состоянии. Значение I_{He} равно

$$I_{\text{He}} = 0,8476 \text{ ат. ед.} = 1,695Ry *).$$

Экспериментальное значение $I_{\text{He}} = 1,810$.

*) 1 ат. ед. энергии = $2Ry = 27 \text{ эв}$.

Экспериментально известны также ионизационные потенциалы других двухэлектронных систем Li^+ , Be^{++} и т. д. Сравнивая их с вычисленными, получим:

| Элемент | He ($Z=2$) | Li^+ ($Z=3$) | Be^{++} ($Z=4$) | B^{+++} ($Z=5$) | C^{++++} ($Z=6$) |
|---------------------------|--------------|-------------------------|----------------------------|----------------------------|-----------------------------|
| Вычисление $I(Ry)$. . . | 1,6952 | 5,445 | 11,195 | 18,945 | 28,695 |
| Экспериментальное $I(Ry)$ | 1,810 | 5,560 | 11,307 | 19,061 | 28,816 |

Результаты вычисления энергии основного состояния находятся в удовлетворительном согласии с опытом.

15. У атома гелия в нормальном состоянии орбитальный и спиновый моменты равны нулю. Вследствие этого гелий обладает диамагнитными свойствами. Диамагнитная восприимчивость, рассчитанная на один грамм-атом, дается следующим выражением:

$$\chi = -\frac{e^2 N_A}{6\mu c^2} (\bar{r}_1^2 + \bar{r}_2^2),$$

где

$$\bar{r}_1^2 + \bar{r}_2^2 = \int (r_1^2 + r_2^2) \psi^2 d\tau_1 d\tau_2;$$

N_A — число Авогадро. Приближенное выражение для волновой функции основного состояния атома гелия

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{Z'^3}{\pi a^3} e^{-Z'(r_1+r_2)/a}.$$

Вычисление среднего значения $\bar{r}_1^2 + \bar{r}_2^2$ с помощью этой функции приводит к следующему результату:

$$\bar{r}_1^2 + \bar{r}_2^2 = \frac{2a^2}{Z'^2}.$$

Подставляя это значение в выражение для диамагнитной восприимчивости, находим:

$$\chi = -1,67 \cdot 10^{-6}.$$

Экспериментальное значение диамагнитной восприимчивости

$$\chi = -(1,90 \pm 0,02) \cdot 10^{-6}.$$

16. Введем для удобства следующие обозначения:

$$Z_1 = \alpha, \quad Z_2 = 2\beta, \quad 2Z_1^{3/2} = a, \quad cZ_2^{3/2} = b.$$

Из условий ортогональности и нормировки находим:

$$\gamma Z_2 = \frac{1}{2}(\alpha + \beta), \quad b^2 = \frac{12\beta^5}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2}.$$

В новых обозначениях ψ_1 и ψ_2 будут иметь вид

$$\psi_1 = \psi_{100} = ae^{-\alpha r} Y_{00}, \quad \psi_2 = \psi_{200} = b \left[1 - \frac{1}{3}(\alpha + \beta)r \right] e^{-\beta r} Y_{00}.$$

Приближенная волновая функция атома лития, находящегося в основном состоянии, может быть представлена следующим образом:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1)\eta_+(\sigma_1) & \psi_1(2)\eta_+(\sigma_2) & \psi_1(3)\eta_+(\sigma_3) \\ \psi_1(1)\eta_-(\sigma_1) & \psi_1(2)\eta_-(\sigma_2) & \psi_1(3)\eta_-(\sigma_3) \\ \psi_2(1)\eta_+(\sigma_1) & \psi_2(2)\eta_+(\sigma_2) & \psi_2(3)\eta_+(\sigma_3) \end{vmatrix},$$

где $\eta_+(\frac{1}{2}) = 1$, $\eta_+(-\frac{1}{2}) = 0$, $\eta_-(\frac{1}{2}) = 0$, $\eta_-(-\frac{1}{2}) = 1$.

В этом состоянии $S = 1/2$, $M = 1/2$.

Оператор Гамильтона *) в данном случае имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \left\{ -\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{Z}{r_i} \right\} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{31}}.$$

Проведем вычисление энергии в состоянии Φ .

Кинетическая энергия электрона в состоянии $1s$ равна

$$T_1 = \int \left\{ -\psi_1 \frac{1}{2} \Delta \psi_1 \right\} d\tau = \int_0^\infty \left(\frac{d\psi_1}{dr} \right)^2 r^2 dr = \frac{1}{2} \alpha^2.$$

*) В атомных единицах $e = \hbar = \mu = 1$.

В состоянии $2s$

$$T_2 = \frac{\beta^2}{6} + \frac{\beta^4}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2}.$$

Энергия взаимодействия внутреннего электрона с ядром

$$U_1 = - \int \frac{Z\psi_1^2}{r} d\tau = Za^2 \int_0^\infty \frac{e^{-2\sigma r}}{r} r^2 dr = -Za,$$

внешнего электрона с ядром

$$U_2 = -\frac{Z\beta}{2} + \frac{Z\beta^2}{2} \frac{\alpha - 2\beta}{\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2} \quad (\text{в случае лития } Z=3)$$

Энергия кулоновского взаимодействия внутренних электронов

$$K_{11} = \int \int \frac{1}{r_{12}} |\psi_1(r_1)|^2 |\psi_1(r_2)|^2 d\tau_1 d\tau_2 = \frac{5}{8} \alpha.$$

Энергия взаимодействия внутренних электронов с внешним

$$\begin{aligned} 2K_{12} &= 2 \int \int \frac{1}{r_{12}} |\psi_1(r_1)|^2 |\psi_2(r_2)|^2 d\tau_1 d\tau_2 = \\ &= 2\alpha \frac{2\alpha^3}{(\alpha + \beta)^2} - \frac{\alpha^4\beta(3\alpha + \beta)}{(\alpha + \beta)^3(\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)}. \end{aligned}$$

Энергия обменного взаимодействия двух электронов с параллельными спинами

$$\begin{aligned} A &= 2a^2b^2 \int_0^\infty e^{-(\alpha+\beta)r_2} \left[1 - \frac{1}{3}(\alpha + \beta)r_2\right] r_2^2 dr_2 \times \\ &\times \int_{r_2}^\infty e^{-(\alpha+\beta)r_1} \left[1 - \frac{1}{3}(\alpha + \beta)r_1\right] r_1 dr_1 = \\ &= \frac{4\alpha^3\beta^5}{(\alpha + \beta)^5(\alpha^2 - \alpha\beta + \beta^2)}. \end{aligned}$$

Полагая $\beta = \lambda\alpha$, получаем:

$$\begin{aligned} 2T_1 + T_2 &= T = \alpha^2\varphi_1(\lambda), \\ 2U_1 + U_2 + K_{11} + 2K_{12} - A &= -\alpha\varphi_2(\lambda), \\ E &= \alpha^2\varphi_1(\lambda) - \alpha\varphi_2(\lambda). \end{aligned}$$

Минимум энергии осуществляется при значениях α и λ , удовлетворяющих условиям

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0$$

или

$$2\alpha\varphi_1(\lambda) - \varphi_2(\lambda) = 0, \quad \alpha\varphi_1'(\lambda) - \varphi_2'(\lambda) = 0.$$

Исключая α , получаем:

$$\frac{\varphi_1'(\lambda)}{\varphi_1(\lambda)} - \frac{2\varphi_2'(\lambda)}{\varphi_2(\lambda)} = 0, \quad \lambda = 0,2846.$$

Соответствующие значения α и β равны

$$\alpha = 2,694, \quad \beta = 0,767.$$

Подставляя найденные значения вариационных параметров в E , получаем для энергии нормального состояния атома лития значение

$$E = -7,414 \text{ ат. ед. или } E = -200,8 \text{ эв.}$$

Экспериментальное значение $E_{\text{эксп}} = -202,54 \text{ эв.}$ Применяя теорию возмущений, т. е. полагая $\alpha = 3$, $\beta = 3/2$, мы получим для энергии основного состояния менее точное, чем при вариационном методе, значение $E = -7,05$ или в электрон-вольтах

$$E = -190,84 \text{ эв.}$$

17. Рассмотрим оператор кинетической энергии ядра \hat{T} . В системе центра инерции

$$\mathbf{P} + \sum \mathbf{p}_i = 0,$$

где \mathbf{P} — импульс ядра, \mathbf{p}_i — импульсы электронов, \hat{T} имеет вид

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2M} = \frac{(\sum \hat{\mathbf{p}}_i)^2}{2M} = \sum \frac{\hat{p}_i^2}{2M} + \sum_{i > k} \frac{\hat{\mathbf{p}}_i \hat{\mathbf{p}}_k}{M}.$$

Поскольку отношение массы электрона к массе ядра $\frac{m}{M} \ll 1$ — искомое смещение, можно вычислить по теории возмущений

$$\Delta E = \int \psi^* \hat{T} \psi d\tau,$$

причем ψ — волновая функция электронов в поле бесконечно тяжелого неподвижного ядра.

Первый член в выражении для \hat{T} отличается лишь множителем $\frac{m}{M}$ от кинетической энергии электронов, которая по теореме вириала равна энергии атома с обратным знаком. Таким образом, ΔE представляется в виде суммы двух членов

$$\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2,$$

$$\Delta E_1 = -\frac{m}{M} E, \quad \Delta E_2 = \frac{1}{M} \int \psi^* \sum_{i > k} \hat{p}_i \hat{p}_k \psi d\tau.$$

Рассмотрим более подробно ΔE_2 . Если в качестве ψ взять произведение волновых функций отдельных электронов, то член ΔE_2 обратился бы в нуль, так как средний импульс электрона в связанном состоянии всегда равен нулю. Однако, если должным образом симметризовать такую волновую функцию, ΔE_2 будет отлично от нуля. Симметризованную собственную функцию атома гелия запишем в виде

$$\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \pm \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)],$$

причем верхний знак относится к парагелию (полный спин $S = 0$), а нижний к ортогелию ($S = 1$).

Представляя это выражение в формулу для ΔE_2 , получаем:

$$\Delta E_2 = \pm \frac{1}{M} \left| \int \psi_1^* \hat{p} \psi_2 d\tau \right|^2.$$

Матричный элемент импульса отличен от нуля, лишь когда $\Delta l = 0, \pm 1$ и, таким образом, ΔE_2 обращается в нуль для состояний $1snd, 1snf$ и т. д.

Беря для $1s$ -электрона и для np -электрона водородные функции с эффективным зарядом соответственно Z_1 и Z_2

$$\psi_{1s}(r) = \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi}} e^{-Z_1 r},$$

$$\psi_{np} = Y_{10} \frac{2Z_2^2}{3} \frac{\sqrt{n^2 - 1}}{n^2} r e^{-\frac{Z_2 r}{n}} F\left(-n + 2, 4; \frac{2Z_2 r}{n}\right),$$

получим:

$$\Delta E_2 = \pm \frac{m}{M} \frac{64}{3} (Z_1 Z_2)^5 \frac{(Z_1 n - Z_2)^{2n-4}}{(Z_1 n + Z_2)^{2n+4}} n^3 (n^2 - 1),$$

причем верхний знак относится к паратерму $1snr^1P$, нижний — к ортотерму $1snr^3P$.

18. Пусть $\psi(x, y, z)$ является решением уравнения Шредингера, относящимся к дискретному спектру энергии. Рассмотрим однопараметрическое семейство нормированных функций вида $\lambda^{3/2}\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)$.

Выражение

$$I(\lambda) = \lambda^3 \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} |\nabla\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)|^2 + U(x, y, z) |\psi(\lambda x, \lambda y, \lambda z)|^2 \right\} dx dy dz,$$

как функция λ , должно иметь экстремум при $\lambda = 1$, т. е.

$$\left(\frac{dI}{d\lambda} \right)_{\lambda=1} = 0.$$

Переходя к новым переменным интегрирования $\lambda x, \lambda y, \lambda z$, получаем:

$$I(\lambda) = \lambda^2 \bar{T} + \lambda^{-\nu} \bar{U}.$$

Откуда находим:

$$2\bar{T} - \nu\bar{U} = 0.$$

Теорема вириала легко обобщается на случай системы многих частиц.

19. а) $Z^{-1/3} \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$, б) $Z^{1/3} \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$, в) $Z^{4/3} \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$, г) $Z^{7/3} \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$,
 д) $Z^{2/3} \frac{e^2}{\hbar}$, е) $Z^{1/3} \hbar$, ж) $Z^{1/3}$.

20. Полная энергия складывается из трех частей: кинетической энергии электронов T , энергии взаимодействия электронов с ядром U_{ne} и энергии взаимодействия электронов между собой U_{ee} . Два последних слагаемых имеют следующий вид:

$$U_{ne} = - \int \frac{Z}{r} \rho d\tau,$$

$$U_{ee} = \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau'.$$

Чтобы вычислить кинетическую энергию, рассмотрим бесконечно-малый элемент объема атома $d\tau$. Число электронов

с импульсами, лежащими в пределах p и $p + dp$, пропорционально фазовому объему и равняется

$$dn = \frac{8\pi p^2 dp d\tau}{(2\pi)^3} = \frac{p^2 dp d\tau}{\pi^2}.$$

Плотность электронов получится интегрированием по p от 0 до некоторого максимального $p = p_0$.

$$\rho = \frac{p_0^3}{3\pi^2}.$$

Кинетическая энергия электронов в объеме $d\tau$

$$dT = \int_0^{p_0} \frac{p^2}{2} dn = \frac{p_0^5}{10\pi^2} d\tau.$$

Выразив в этой формуле p_0 через ρ и интегрируя по объему атома, находим кинетическую энергию электронов

$$T = \frac{1}{10\pi^2} (3\pi^2)^{5/3} \int \rho^{5/3} d\tau.$$

Окончательно для полной энергии получаем:

$$\begin{aligned} E &= T + U_{ne} + U_{ee} = \\ &= \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2} \int \rho^{5/3} d\tau - Z \int \frac{\rho}{r} d\tau + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau'. \end{aligned}$$

22. Элемент объема, выраженный через x , имеет вид

$$d\tau = 4\pi r^2 dr = 8\pi \lambda^3 x^5 dx.$$

Вычисляем кинетическую энергию

$$T = \frac{12 (3\pi^2)^{5/3}}{25\pi} \lambda^3 A^{5/3}$$

и энергию взаимодействия электронов с ядром

$$U_{ne} = -8\pi A \lambda^2 Z.$$

Для того чтобы вычислить $U_{ee} = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau'$, найдем сначала потенциал, создаваемый электронами φ_e . Решая уравнение Пуассона

$$\Delta \varphi_e = 4\pi \rho,$$

получим:

$$\varphi_e = -\frac{16\pi A\lambda^2}{x^2} [1 - e^{-x}(x+1)].$$

Вычисляя теперь U_{ee} с помощью теоремы Грина, находим:

$$U_{ee} = -\frac{1}{2} \int \varphi_e \rho \, d\tau = 16\pi^2 A^2 \lambda^5.$$

Из условия нормировки определяем A

$$\int \rho \, d\tau = 16\pi A \lambda^3 = N.$$

Подставляя $A = \frac{N}{16\pi\lambda^3}$ в выражения для T , U_{ne} , U_{ee} , получим:

$$T = \frac{12}{25\pi} \left(\frac{3\pi N}{16}\right)^{5/3} \frac{1}{\lambda^2},$$

$$U_{ne} = -\frac{ZN}{2\lambda},$$

$$U_{ee} = \frac{N^2}{16\lambda}.$$

Минимум $E = T + U_{ne} + U_{ee}$ достигается при

$$\lambda = \frac{9}{25} \left(\frac{3\pi N}{16}\right)^{2/3} \frac{1}{Z - \frac{N}{8}}$$

и составляет

$$E = \frac{25}{36} \left(\frac{16}{3\pi}\right)^{2/3} N^{1/3} \left(Z - \frac{N}{8}\right)^2 \text{ ат. ед.}$$

Для нейтрального атома

$$E = \frac{25 \cdot 49}{36 \cdot 64} \left(\frac{16}{3\pi}\right)^{2/3} Z^{7/3} = 0,758 Z^{7/3} \text{ ат. ед.}$$

23. Пусть $\rho(\mathbf{r})$ — выражение для электронной плотности в модели Томаса-Ферми. Тогда $\rho(\mathbf{r})$ осуществляет минимум энергии атома

$$E = \frac{(3\pi^2)^{5/3}}{10\pi^2} \int \rho^{5/3} \, d\tau - Z \int \frac{\rho}{r} \, d\tau + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \, d\tau \, d\tau'.$$

Если в это выражение вместо ρ подставить функцию $\lambda^3 \rho(\lambda \mathbf{r})$, удовлетворяющую тому же условию нормировки, что и $\rho(\mathbf{r})$,

то получим $E(\lambda) = \lambda^2 T + \lambda U$, где T — кинетическая, а U — потенциальная энергия электронов в атоме. Поскольку $E(\lambda)$ должно иметь минимум при $\lambda = 1$, находим, что должно выполняться равенство

$$2T + U = 0,$$

выражающее теорему вириала.

24. Энергия взаимодействия между электронами может быть записана в виде

$$U_{ee} = -\frac{1}{2} \int \varphi_e \rho \, d\tau = \frac{Z}{2} \int \frac{\rho}{r} \, d\tau - \frac{1}{2} \int \varphi \rho \, d\tau, \quad (1)$$

где φ_e — потенциал, создаваемый электронами, а φ — потенциал самосогласованного поля, включающий поле ядра

$$\varphi = \varphi_e + \frac{Z}{r}.$$

В модели Томаса-Ферми выполняются соотношения

$$\frac{p_0^2}{2} = \varphi - \varphi_0, \quad \rho = \frac{p_0^3}{3\pi^2},$$

где p_0 — максимальный импульс, φ_0 — потенциал на границе атома. Исключая отсюда p_0 и выражая в формуле (1) φ через ρ , находим:

$$U_{ee} = \frac{Z}{2} \int \frac{\rho}{r} \, d\tau - \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{4} \int \rho^{5/3} \, d\tau - \frac{\varphi_0 N}{2}.$$

Первые два члена лишь множителями отличаются от энергии взаимодействия электронов с ядром

$$U_{ne} = -Z \int \frac{\rho}{r} \, d\tau$$

и кинетической энергии

$$T = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10} \int \rho^{5/3} \, d\tau.$$

Таким образом,

$$U_{ee} = -\frac{1}{2} U_{ne} - \frac{5}{6} T - \frac{\varphi_0 N}{2}.$$

Подставляя сюда значения T из теоремы вириала

$$2T = -U_{ne} - U_{ee},$$

окончательно находим:

$$U_{ee} = -\frac{1}{7} U_{ne} - \frac{6}{7} \varphi_0 N.$$

Для нейтрального атома ($N = Z$) $\varphi_0 = 0$ и

$$U_{ee} = -\frac{1}{7} U_{ne}.$$

25. Энергия полной ионизации равна полной энергии электронов, взятой с обратным знаком. Используя теорему вириала, находим (см. предыдущую задачу):

$$E_{\text{ион}} = -\frac{3}{7} U_{ne} + \frac{3}{7} \varphi_0 N.$$

Преобразуем выражение

$$U_{ne} = -Z \int \frac{\rho}{r} d\tau$$

следующим образом: введем потенциал φ_e , создаваемый электронами

$$\Delta \varphi_e = 4\pi\rho$$

и используем теорему Грина

$$U_{ne} = -\frac{Z}{4\pi} \int \frac{\Delta \varphi_e}{r} d\tau = Z\varphi_e(0)$$

(поверхностный интеграл на границе атома равен нулю и $\Delta \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$).

Итак,

$$E_{\text{ион}} = -\frac{3}{7} Z\varphi_e(0) + \frac{3}{7} N\varphi_0.$$

Переходя к томас-фермиевским единицам

$$r = xbZ^{-1/3}, \quad b = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{2/3}, \quad \varphi = \varphi_0 = \frac{Z^{4/3} \chi(x)}{b x},$$

находим:

$$\varphi_e(r) = \varphi - \frac{Z}{r} = \varphi_0 - \frac{Z^{4/3}}{b} [1 - \chi(x)],$$

и поскольку для малых x

$$\chi(x) = 1 - ax + \frac{4}{3} x^{3/2},$$

где $a = a_0 = 1,58$ для нейтрального атома (для положительного иона $a > a_0$), то окончательно

$$E_{\text{ион}} = \frac{3}{7} \frac{Z^{7/3}}{b} a - \frac{3}{7} \frac{(Z - N)^2 Z^{1/3}}{b x_0},$$

x_0 — радиус $(Z - N)$ -кратного иона.

26. Потенциал точечного кулоновского центра совпадает с потенциалом заряженной по поверхности сферы вне этой сферы, поскольку полный заряд в обоих случаях одинаков. Внутри сферы разница двух потенциалов составляет

$$\Delta\varphi = -Ze \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right).$$

Изменение потенциальной энергии электронов атома

$$\Delta U = -Ze^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{a} \right) \varepsilon(r_i),$$

где введена вспомогательная функция

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} 1 & r < a, \\ 0 & r > a. \end{cases}$$

Смещение уровней энергии в первом приближении теории возмущений

$$\Delta E = -Ze^2 \int |\psi|^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{a} \right) \varepsilon(r_i) d\tau_1 \dots d\tau_N.$$

Интегрирование по всем переменным, кроме одной, дает:

$$\int |\psi(r_1 \dots r_N)|^2 d\tau_2 \dots d\tau_N = \frac{1}{N} \rho(r),$$

где $\rho(r)$ — электронная плотность.

Таким образом,

$$\Delta E = -Ze^2 \int \rho(r) \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{a} \right) \varepsilon(r) d\tau.$$

Воспользуемся тем, что $\rho(r)$ мало изменяется в области $r < a$. Вынося эту величину за знак интеграла в точке $r = 0$, получаем

$$\Delta E = -Ze^2 \rho(0) \frac{2\pi}{3} a^2.$$

27. Волновая функция s -электрона

$$\psi_n(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi_n(r)}{r},$$

где χ_n удовлетворяет уравнению

$$\chi_n'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E_n - U(r)] \chi_n = 0$$

и нормировочному условию $\int_0^\infty \chi_n^2 dr = 1$.

Решение уравнения для χ_n в квазиклассическом приближении имеет вид

$$\chi_n = \frac{A_n}{\sqrt{p_n}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p_n dr + \varphi \right), \quad (1)$$

где

$$p_n = \sqrt{2\mu [E_n - U(r)]}.$$

Это решение, однако, непригодно в области малых r . В самом деле, если r мало ($r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2}$) то, во-первых, можно пренебречь экранированием поля ядра и положить $U(r) = -\frac{Ze^2}{r}$; во-вторых, можно также пренебречь E_n по сравнению с $U(r)$. Подставляя $p = \sqrt{\frac{2\mu Ze^2}{r}}$ в условие применимости квазиклассического приближения

$$\frac{d\left(\frac{\hbar}{p}\right)}{dr} \ll 1,$$

получаем:

$$Z \gg \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2}.$$

Чтобы получить для χ_n выражение, пригодное в области малых r , вернемся к исходному уравнению и заменим в нем $U(r)$ на $-\frac{Ze^2}{r}$, а также пренебрежем E_n :

$$\chi_n'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{r} \chi_n = 0.$$

Это уравнение имеет решение

$$\chi_n = C_n V^{-r} J_1 \left(2 \sqrt{\frac{2\mu Ze^2 r}{\hbar^2}} \right). \quad (2)$$

Чтобы найти связь между постоянными C_n и A_n , замечаем, что область применимости квазиклассического решения (1)

$$r \gg \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}$$

и область применимости решения (2), в которой пренебрегается экранированием поля ядра,

$$r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2}$$

при больших Z перекрываются и поэтому решения (1) и (2) в области $\frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2}$ должны совпадать.

Покажем, что вид решений (1) и (2) одинаков в общей области применимости. Для этого положим в (1) $p = \sqrt{\frac{2\mu Ze^2}{r}}$. Тогда получаем

$$\chi_n = \frac{A_n \sqrt[4]{r}}{\sqrt[4]{2\mu Ze^2}} \cos \left(\frac{2 \sqrt{2\mu Ze^2 r}}{\hbar} + \varphi \right) \quad \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2}. \quad (3)$$

Условие $r \gg \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}$ означает, что аргумент бесселевой функции в (2) велик. Но для больших аргументов ($x \gg 1$)

$$J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos \left(x - \frac{3\pi}{4} \right).$$

Таким образом, решение (2) принимает вид

$$\chi_n = C_n V^{-r} \sqrt{\frac{\hbar}{\pi \sqrt{2\mu Ze^2 r}}} \cos \left(\frac{2 \sqrt{2\mu Ze^2 r}}{\hbar} - \frac{3\pi}{4} \right) \quad \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{1/3} \mu e^2}.$$

Сравнивая эту формулу с (3), найдем:

$$\varphi = -\frac{3\pi}{4}, \quad A_n = C_n \sqrt{\frac{\hbar}{\pi}}.$$

Теперь можно найти $\psi^2(0)$

При $x \ll 1$ имеем $J_1(x) = \frac{x}{2}$ и с помощью формулы (2) находим:

$$\frac{\gamma_n}{r} \Big|_{r \rightarrow 0} = C_n \sqrt{\frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2\pi\mu Z e^2}{\hbar^3}} A_n.$$

Следовательно,

$$\psi_n^2(0) = \frac{\mu Z e^2}{2\hbar^3} A_n^2.$$

Постоянную A_n определим из условия нормировки

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \gamma_n^2 dr &= A_n^2 \int_0^\infty \frac{\cos^2\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^r p_n dr - \frac{3\pi}{4}\right)}{\sqrt{2\mu [E_n - U(r)]}} dr \approx \\ &\approx \frac{A_n^2}{2} \int \frac{dr}{\sqrt{2\mu [E_n - U(r)]}} = 1. \end{aligned}$$

Дифференцируя по n условие квантования,

$$\int \sqrt{2\mu [E_n - U(r)]} dr = \pi(n + \gamma)\hbar,$$

которое определяет E_n как функцию от n , находим:

$$\mu \frac{dE_n}{dn} \int \frac{dr}{\sqrt{2\mu [E_n - U(r)]}} = \pi\hbar.$$

Сравнивая последнее выражение с условием нормировки, получим:

$$A_n^2 = \frac{2\mu}{\pi\hbar} \frac{dE_n}{dn}$$

и окончательно

$$\psi_n^2(0) = \frac{Z e^2 \mu^2}{\pi \hbar^4} \frac{dE_n}{dn}. \quad (4)$$

Для незранированного кулоновского поля $E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$ и найденное из формулы (4) $\psi_n^2(0) = \frac{Z^3}{\pi n^3} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3$ совпадает с полученным из точного расчета. В атомной спектроскопии для уровней энергии возбужденных состояний валентного электрона часто используется формула

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n - \sigma)^2},$$

где σ — так называемая поправка Ридберга, слабо зависящая от n . Приняв для E_n эту формулу, получаем:

$$\psi^2(0) = \frac{Z}{\pi} \frac{\mu^3 e^8}{\hbar^6} \left(1 - \frac{d\sigma}{dn}\right) \frac{1}{(n - \sigma)^3}.$$

28. Пусть электрон находится в стационарном состоянии, с определенным значением проекции момента импульса m . Волновая функция такого состояния равна

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) P_l^{(m)}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}.$$

Плотность электрического тока в состоянии ψ_{nlm} в полярной системе координат r, ϑ, φ имеет вид

$$J_r = J_\vartheta = 0, \quad J_\varphi = -\frac{|e| \hbar m}{\mu r \sin \vartheta} |\psi_{nlm}|^2.$$

Очевидно, что вектор напряженности магнитного поля будет направлен по оси Z . Круговой ток силы dJ создает в точке O (см. рис. 28) магнитное поле, напряженность которого равна

$$d\mathcal{H}_z = \frac{dJ}{rc} 2\pi \sin^2 \vartheta; \quad \text{так как} \quad dJ = J_\varphi r d\vartheta dr,$$

то

$$\mathcal{H}_z = -\frac{2\pi |e| \hbar m}{\mu c} \int_0^\infty \frac{R^2}{r} dr \int_0^\pi |P_l^{(m)}|^2 \sin \vartheta d\vartheta = -\frac{m |e| \hbar}{\mu c} \int_0^\infty \frac{R^2}{r} dr.$$

Этот результат можно получить и иным способом.

Как известно из электродинамики, напряженность магнитного поля, создаваемого при движении заряда, равна (запаздывание не учитывается)

$$\mathcal{H} = \frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} [\mathbf{r} \mathbf{p}] = \frac{e}{\mu c} \frac{1}{r^3} \mathbf{l},$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор, проведенный из точки наблюдения, \mathbf{l} — момент количества движения.

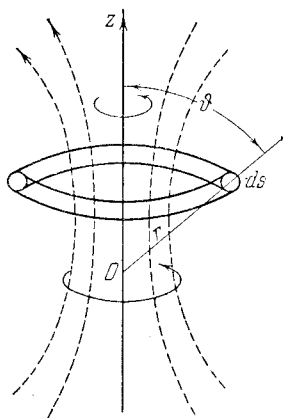


Рис. 28.

В квантовой теории для определения среднего значения напряженности магнитного поля нужно вычислить интеграл вида

$$\overline{\mathcal{H}}_z = - \frac{|e| \hbar}{\mu c} \int \psi^* \frac{\hat{l}_z}{r^3} \psi d\tau; \quad \text{так как} \quad \hat{l}_z \psi = m \psi,$$

то

$$\overline{\mathcal{H}}_z = -m \frac{|e| \hbar}{\mu c} \frac{1}{r^3} = -m \frac{|e| \hbar}{\mu c} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2} \right)^3 \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l + 1)}.$$

Среднее значение \mathcal{H}_x , \mathcal{H}_y в нашем случае будет равно нулю вследствие того, что

$$\int \psi_{nlm}^* \hat{l}_y \psi_{nlm} d\tau = \int \psi_{nlm}^* \hat{l}_x \psi_{nlm} d\tau = 0.$$

Для состояния $2p$ ($m = 1$) получаем:

$$\overline{\mathcal{H}}_z = - \frac{1}{12} \frac{|e| \hbar}{2\mu c} \left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2} \right)^3, \quad \text{т. е.} \quad \overline{\mathcal{H}}_z \sim 10^4 \text{ гаусс.}$$

29. Магнитный момент частицы равен

$$\mathfrak{M} = \frac{e}{2\mu c} \int \psi^* \hat{l} \psi d\tau.$$

В случае двух частиц введем новые переменные: координаты центра масс (X, Y, Z) и координаты, характеризующие взаимное расстояние (x, y, z).

Среднее значение магнитного момента, выраженное через новые переменные, будет равно

$$\overline{\mathfrak{M}}_z = \frac{e}{2c} \int \psi^* \left\{ \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \left(X \frac{\partial}{\partial y} - Y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{m+M} \left(x \frac{\partial}{\partial Y} - y \frac{\partial}{\partial X} \right) + \frac{m-M}{mM} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \psi dr,$$

и аналогично для $\overline{\mathfrak{M}}_x$ и $\overline{\mathfrak{M}}_y$.

В стационарном состоянии средние значения координат x, y, z и импульсов $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ обращаются в нуль. Вследствие этого последнее выражение упростится и примет вид

$$\overline{\mathfrak{M}}_z = - \frac{e}{2mc} \left(1 - \frac{m}{M} \right) \int \psi^* \left\{ -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \psi d\tau.$$

В этой задаче m — масса электрона, а M — масса ядра.

$$30. \Delta E = 0,00844 \cdot 2,79 \frac{Z^3}{n^3} \text{ см}^{-1}.$$

Для основного состояния водородного атома ($Z = n = 1$)

$$\Delta E = 0,0235 \text{ см}^{-1}.$$

31. Для определения энергии необходимо найти напряженность магнитного поля, создаваемого электроном. Вследствие орбитального движения электрона в той точке, в которой находится ядро, возникает магнитное поле, напряженность которого по закону Био и Савара равна

$$\mathfrak{H}_l = \frac{1}{c} \frac{[\mathbf{r}\mathbf{j}]}{r^3},$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор, направленный от ядра к электрону, а $\mathbf{j} = -e\mathbf{v}$ (заряд электрона — e). Введем оператор орбитального момента \hat{l} . Тогда для \mathfrak{H}_l получим:

$$\hat{\mathfrak{H}}_l = -\frac{eh}{\mu c} \frac{1}{r^3} \hat{l}.$$

Вследствие того, что электрон, помимо электрического заряда, имеет спиновый магнитный момент, полная напряженность магнитного поля в указанной точке равна

$$\hat{\mathfrak{H}} = \hat{\mathfrak{H}}_l + \hat{\mathfrak{H}}_s = \frac{eh}{\mu c r^3} \left\{ \hat{s} - \frac{3(\mathbf{r}\hat{s})\mathbf{r}}{r^2} - \hat{l} \right\}.$$

Таким образом, оператор энергии сверхтонкой структуры мы можем представить следующим образом:

$$\hat{w} = -\beta \hat{i} \hat{\mathfrak{H}},$$

здесь \hat{i} — оператор спина ядра, а $\beta \hat{i}$ — магнитный момент. Будем рассматривать \hat{w} как малое возмущение. Невозмущенное состояние характеризуется квантовыми числами n , j ($j = l + 1/2$, $j = l - 1/2$), l (предполагаем наличие LS связи).

Для определения энергии сверхтонкой структуры мы должны усреднить оператор \hat{w} по состоянию с квантовыми числами

$$f, j, l (\mathbf{f} = \mathbf{j} + \mathbf{i}).$$

На основании формулы

$$(\hat{A})_{fm}^{fm'} = \frac{(\hat{f}A)_f^f}{f(f+1)} (\hat{f})_{fm}^{fm'}$$

имеем:

$$(\hat{\mathcal{H}})_{nljm_j}^{nljm'_j} = -\frac{e\hbar}{\mu c} \left(\frac{1}{r^3}\right)_{nljm_j}^{nljm'_j} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} (\hat{j})_{jm_j}^{jm'_j}.$$

Используя это соотношение, легко показать, что оператор $\hat{\omega}$ может быть представлен в виде

$$\hat{\omega} = \frac{e\hbar}{\mu c} \beta \frac{1}{r^3} \frac{l(l+1)}{j(j+1)} (\hat{i}\hat{j}).$$

Отсюда следует, что энергия E сверхтонкой структуры определяется выражением

$$E = \frac{e\hbar}{2\mu c} \beta \left(\frac{1}{r^3}\right) \frac{l(l+1)}{j(j+1)} \{f(f+1) - j(j+1) - i(i+1)\}.$$

Таким образом, при учете сверхтонкой структуры каждый терм, характеризуемый числами n , l , j , расщепляется на

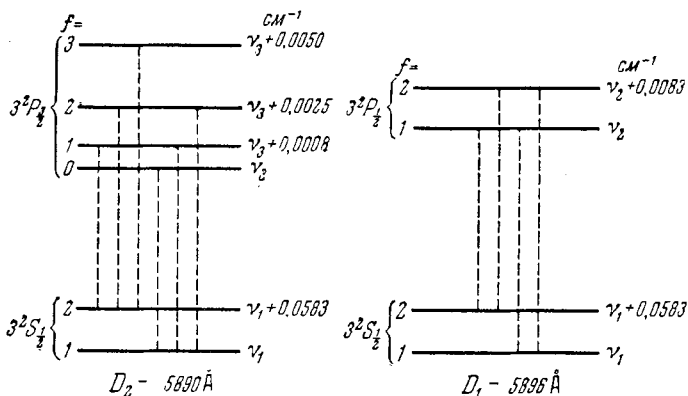


Рис. 29.

$2i+1$ компонент (если $j > i$). Совокупность различных значений f дает правило интервалов для сверхтонкой мультиплетной структуры.

Отметим, что путем простого подсчета числа компонент сверхтонкой структуры в спектре данного изотопа

можно определить спин ядра. На рис. 29 изображена сверхтонкая мультиплетная структура D -линий натрия.

Тонкая структура, т. е. наличие дублета (линии $D_1 = 5896 \text{ \AA}$, соответствующая переходу $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$ и $D_2 = 5890 \text{ \AA}$, соответствующая переходу $3^2P_{1/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$), объясняется спин-орбитальным взаимодействием (см. задачу 10 § 7).

32. В диамагнитных атомах равен нулю не только полный момент, но равны нулю порознь как результирующий орбитальный момент, так и результирующий спиновый момент электронов. Вследствие прецессии электрон приобретает добавочную скорость

$$\mathbf{v}' = \frac{e}{2\mu c} [\mathcal{H} \mathbf{r}].$$

Обозначая через \mathbf{A} векторный потенциал внешнего магнитного поля $\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H} \mathbf{r}]$, последнее соотношение можно переписать в виде

$$\mathbf{v}' = \frac{e}{\mu c} \mathbf{A}.$$

Плотность тока, возникающего вследствие прецессий электронных оболочек, равна

$$\mathbf{J} = \frac{e}{\mu c} \mathbf{A} \rho(\mathbf{r}),$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — плотность заряда в точке \mathbf{r} (заряд электрона равен $-e$). Определим сперва векторный потенциал \mathbf{A}' индуцированного магнитного поля

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \frac{e}{2\mu c^2} \int [\mathcal{H} \mathbf{r}'] \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau'.$$

Используя формулу

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{12}} &= \frac{1}{\sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr \{ \cos \theta \cos \vartheta + \sin \theta \sin \vartheta \cos(\Phi - \varphi) \}}} = \\ &= \sum_{l, m} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \frac{Y_{lm}^*(\theta, \Phi) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}{Y_{l0}(0)} \begin{cases} \frac{r^l}{R^{l+1}}, & r < R, \\ \frac{R^l}{r^{l+1}}, & R < r, \end{cases} \end{aligned}$$

получаем выражение для A' :

$$A'(r) = \frac{e}{6\mu c^2} [\mathcal{H}r] \cdot \left\{ \frac{1}{r^3} \int_{r' < r} r'^2 \rho(r') d\tau' + \int_{r' > r} \frac{\rho(r')}{r'} d\tau' \right\}.$$

С помощью последнего выражения легко вычислить напряженность магнитного поля в направлении оси z .

Напряженность равна

$$\mathcal{H}'_z = \left(\frac{e\mathcal{H}}{2\mu c^2 r^3} \right) \left(z^2 - \frac{1}{3} r^2 \right) \int_{r' < r} r'^2 \rho(r') d\tau' + \frac{e\mathcal{H}}{3\mu c^2} \int_{r' > r} \frac{\rho(r')}{r'} d\tau'.$$

Индукированное поле в центре атома, т. е. поле, действующее на ядро

$$\mathcal{H}'_z(0) = \frac{e\mathcal{H}}{3\mu c^2} \int \frac{\rho(r')}{r'} d\tau' = \frac{e\mathcal{H}}{3\mu c^2} \varphi(0),$$

зависит от электростатического потенциала $\varphi(0)$, производимого электронами.

В модели Томаса — Ферми

$$\varphi(0) = -1,588 \frac{Ze}{b}, \quad \text{где } b = 0,858 \frac{a}{Z^{1/3}}, \quad a = \frac{h^2}{\mu e^2},$$

и, следовательно,

$$\mathcal{H}'_z(0) = -0,319 \cdot 10^{-4} Z^{4/3} \mathcal{H}.$$

$$33. \quad \mathcal{H}'_z(0) = -\frac{27 e^2 \mathcal{H}}{24 \mu c^2 a} = -0,599 \cdot 10^{-4} \mathcal{H}.$$

$$34. \quad {}^1S_0, {}^3S_1, {}^3P_{0,1,2}, {}^2D_{3/2}^{41}, {}^5/2, {}^4D_{1/2, 3/2, 5/2, 7/2}.$$

$$35. \text{ а) } {}^1S_0 {}^3S_1;$$

$$\text{ б) } {}^1P_1 {}^3P_{012};$$

$$\text{ в) } {}^1D_2 {}^3D_{123};$$

$$\text{ г) } {}^1S_0 {}^3S_1 {}^1P_1, {}^3P_{012} {}^1D_2 {}^3D_{123}.$$

$$36. \text{ а) } {}^4S {}^2P {}^2D;$$

$$\text{ б) } {}^1S {}^3P {}^1D {}^3F {}^1G;$$

$$\text{ в) } {}^2S {}^2P {}^4P {}^2D.$$

$$37. \text{ O } {}^3P_2, \text{ Cl } {}^2P_{3/2}, \text{ Fe } {}^2D_4, \text{ Co } {}^4F_{7/2}, \text{ As } {}^4S_{3/2}, \text{ La } {}^2D_{3/2}.$$

$$38. \text{ K, Zn, C, O — четные; B, N, Cl — нечетные.}$$

39. Если все тройки квантовых чисел различны, то число состояний равно числу сочетаний из N по $\frac{N}{2} + M_s$, т. е.

$$g(M_s) = C_{\frac{N}{2}}^{N+M_s}.$$

Если имеется N' пар одинаковых троек квантовых чисел n , l , m_l , то

$$g(M_s) = C_{\frac{N-2N'}{2}}^{\frac{1}{2}(N-2N')+M_s}.$$

40. Число состояний равно

$$\frac{N_l(N_l-1)\dots(N_l-x+1)}{x!}, \text{ где } N_l = 2(2l+1).$$

42. С целью краткости антисимметричную волновую функцию вида

$$\Phi = \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_1) & \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_2) & \dots & \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_N) \\ \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_1) & \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_2) & \dots & \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_1) & \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_2) & \dots & \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_N) \end{vmatrix},$$

составленную из функций одноэлектронной проблемы, будем обозначать следующим образом:

$$\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \dots, n^N l^N m_l^N m_s^N).$$

Рассмотрим действие симметричного оператора

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \sum_{i=1}^N (\hat{l}_x^i - i\hat{l}_y^i)$$

на антисимметричную функцию

$$\Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \dots, n^N l^N m_l^N m_s^N).$$

Легко видеть, что

$$\begin{aligned} & (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \dots) = \\ & = \sqrt{(l^1 + m_l^1)(l^1 - m_l^1 + 1)} \Phi(n^1 l^1 m_l^1 - 1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 m_s^2, \dots) + \\ & + \sqrt{(l^2 + m_l^2)(l^2 - m_l^2 + 1)} \Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, n^2 l^2 m_l^2 - 1 m_s^2, \dots) + \dots \\ & \dots + \sqrt{(l^N + m_l^N)(l^N - m_l^N + 1)} \Phi(n^1 l^1 m_l^1 m_s^1, \dots, n^N l^N m_l^N - 1 m_s^N). \end{aligned}$$

Результаты действия оператора $\hat{S}_x - i\hat{S}_y$ аналогичны, только вместо m_l понижаются на 1 значения m_s .

Если волновая функция является собственной функцией четырех коммутирующих операторов \hat{S}^2 , \hat{L}^2 , \hat{S}_z , \hat{L}_z , то действие операторов $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$ и $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$ сводится к следующему:

$$\left. \begin{aligned} (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \Phi(SLM_S M_L) &= \\ &= \sqrt{(L + M_L)(L - M_L + 1)} \Phi(SLM_S M_L - 1), \\ (\hat{S}_x - i\hat{S}_y) \Phi(SLM_S M_L) &= \\ &= \sqrt{(S + M_S)(S - M_S + 1)} \Phi(SLM_S - 1 M_L). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

После этих предварительных замечаний приступим непосредственно к решению нашей задачи.

В рассматриваемом случае мы имеем дело с эквивалентными электронами, поэтому квантовые числа nl можно везде опустить. Значение проекции спинового момента будем иногда указывать посредством индексов (\pm), расположенных над m_l .

Приведем для конфигурации p^3 классификацию состояний по M_S и M_L (ограничиваемся только неотрицательными значениями) и получающиеся в каждом случае термы

| M_S | M_L | | | | | |
|---------------|-------|------------------------|-----------|-----------|----------|--|
| $\frac{3}{2}$ | 0 | $\Phi(1^+, -1^+, 0^+)$ | [4S] | Φ_1 | | |
| $\frac{1}{2}$ | 0 | $\Phi(1^+, -1^+, 0^-)$ | [4S] | Φ_2 | | |
| | | $\Phi(1^-, -1^+, 0^+)$ | | [2P] | Φ_3 | |
| | | $\Phi(1^+, -1^-, 0^+)$ | | [2D] | Φ_4 | |
| $\frac{1}{2}$ | 1 | $\Phi(1^+, 1^-, -1^+)$ | [2P] | Φ_5 | | |
| | | $\Phi(1^+, 0^+, 0^-)$ | | [2D] | Φ_6 | |
| $\frac{1}{2}$ | 2 | $\Phi(1^+, 1^-, 0^+)$ | [2D] | Φ_7 | | |

Затем вычислим действие операторов $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$, $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$ на некоторые из приведенных выше состояний

$$\begin{aligned} (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \Phi_5 &= \sqrt{2}(\Phi_3 - \Phi_2), \\ (\hat{L}_x - i\hat{L}_y) \Phi_6 &= \sqrt{2}(\Phi_2 - \Phi_4), \end{aligned}$$

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_7 = \sqrt{2}(\Phi_5 - \Phi_6),$$

$$(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi_1 = \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4,$$

Φ_1 есть волновая функция состояния 4S с $M_S = \frac{3}{2}$, $M_L = 0$.

Действуя на эту функцию оператором $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$, согласно (1) получим:

$$(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi\left({}^4S, \frac{3}{2}, 0\right) = \sqrt{3}\Phi\left({}^4S, \frac{1}{2}, 0\right),$$

так как

$$(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi_1 = \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4,$$

то

$$\Phi\left({}^4S, \frac{1}{2}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4).$$

Аналогично для терма 2D получим следующие волновые функции:

$$\Phi\left({}^2D, \frac{1}{2}, 2\right) = \Phi_7,$$

$$\Phi\left({}^2D, \frac{1}{2}, 1\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5 - \Phi_6),$$

$$\Phi\left({}^2D, \frac{1}{2}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{6}}(\Phi_3 - 2\Phi_2 + \Phi_4).$$

Состояние ${}^2P, \frac{1}{2}, 1$ ($M_S = \frac{1}{2}$, $M_L = 1$) представляет собой линейную комбинацию состояний Φ_5 и Φ_6 , ортогональную к состоянию ${}^2D, \frac{1}{2}, 1$. Из этих соображений находим:

$$\Phi\left({}^2P, \frac{1}{2}, 1\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5 + \Phi_6),$$

и далее

$$\Phi\left({}^2P, \frac{1}{2}, 0\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_3 - \Phi_4).$$

Таким же самым способом можно получить волновые функции, соответствующие отрицательным значениям проекции.

43. Как следует из приведенной ниже таблицы для определения собственных функций двух термов 2D , необходимо вычислить сперва собственные функции термов 2H , 2G , 4F , 2F .

| M_S | M_L | | | |
|---------------|-------|------------------------|-------------|--|
| $\frac{1}{2}$ | 5 | $\Phi(2^+, 2^-, 1^+)$ | Φ_1 | $[{}^2H]$ |
| $\frac{1}{2}$ | 4 | $\Phi(2^+, 2^-, 0^+)$ | Φ_2 | $\left[\begin{array}{c} {}^2H \\ {}^2G \end{array} \right]$ |
| | | $\Phi(2^+, 1^+, 1^-)$ | Φ_3 | |
| $\frac{1}{2}$ | 3 | $\Phi(2^+, 2^-, -1^+)$ | Φ_4 | $\left[\begin{array}{c} {}^2H \\ {}^2G \\ {}^4F \\ {}^2F \end{array} \right]$ |
| | | $\Phi(2^+, 1^+, 0^-)$ | Φ_5 | |
| | | $\Phi(2^+, 1^-, 0^+)$ | Φ_6 | |
| | | $\Phi(2^-, 1^+, 0^+)$ | Φ_7 | |
| $\frac{1}{2}$ | 2 | $\Phi(2^+, 2^-, -2^+)$ | Φ_8 | $\left[\begin{array}{c} {}^2H \\ {}^2G \\ {}^4F \\ {}^2F \\ {}^2D \\ {}^2D \end{array} \right]$ |
| | | $\Phi(2^+, 1^+, -1^-)$ | Φ_9 | |
| | | $\Phi(2^+, 1^-, -1^+)$ | Φ_{10} | |
| | | $\Phi(2^-, 1^+, -1^+)$ | Φ_{11} | |
| | | $\Phi(2^+, 0^+, 0^-)$ | Φ_{12} | |
| | | $\Phi(1^+, 1^-, 0^+)$ | Φ_{13} | |
| $\frac{3}{2}$ | 3 | $\Phi(2^+, 1^+, 0^+)$ | Φ_{14} | $[{}^4F]$ |
| $\frac{3}{2}$ | 2 | $\Phi(2^+, 1^+, -1^+)$ | Φ_{15} | $[{}^4F]$ |

Найдем сперва результат действия операторов $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$, $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$ на некоторые из приведенных выше состояний:

$$\begin{aligned}
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_1 &= -2\Phi_3 + \sqrt{6}\Phi_2, \\
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_2 &= -2\Phi_7 + 2\Phi_6 + \sqrt{6}\Phi_4, \\
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_3 &= -\sqrt{6}\Phi_5 + \sqrt{6}\Phi_5, \\
 (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi_{14} &= \Phi_7 + \Phi_6 + \Phi_5, \\
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_4 &= -2\Phi_{11} + 2\Phi_{10} + 2\Phi_6, \\
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_5 &= \sqrt{6}\Phi_{12} + \sqrt{6}\Phi_9, \\
 (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi_{15} &= \Phi_{11} + \Phi_{10} + \Phi_9, \\
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_6 &= 2\Phi_{13} - \sqrt{6}\Phi_{12} + \sqrt{6}\Phi_{10}, \\
 (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_7 &= -2\Phi_{13} + \sqrt{6}\Phi_{11}.
 \end{aligned}$$

Волновая функция состояния ${}^2H, \frac{1}{2}, 5$ ($M_S = \frac{1}{2}, M_L = 5$) равна Φ_1 , т. е. $\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 5\right) = \Phi_1$. Применяя оператор $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$, получаем:

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 5\right) = \sqrt{10}\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 4\right).$$

Так как $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\Phi_1 = -2\Phi_3 + \sqrt{6}\Phi_2$, то

$$\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 4\right) = \frac{1}{\sqrt{10}}\{\sqrt{6}\Phi_2 - 2\Phi_3\}.$$

Другие, нужные для решения задачи, состояния термина 2H находим последовательно:

$$\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{30}}\{\sqrt{6}\Phi_4 - 2\Phi_5 + 4\Phi_6 - 2\Phi_7\},$$

$$\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{30}}\{\Phi_8 - \Phi_9 + 3\Phi_{10} - 2\Phi_{11} - 3\Phi_{12} + \sqrt{6}\Phi_{13}\}.$$

Состояние $\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 4\right)$ представляет собой линейную комбинацию состояний Φ_2 и Φ_3 , ортогональную к состоянию $\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 4\right)$. Из этих условий определяем волновую функцию $\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 4\right)$

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 4\right) = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{10}}\{2\Phi_2 + \sqrt{6}\Phi_3\}.$$

Так как состояния разных термов не связаны никакими фазовыми соотношениями, мы можем положить $\alpha = 0$.

Другие состояния термина 2G получаются посредством последовательного применения оператора $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$. Итак, имеем:

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 4\right) = \frac{1}{\sqrt{10}}\{2\Phi_2 + \sqrt{6}\Phi_3\},$$

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{20}}\{\sqrt{6}\Phi_4 + 3\Phi_5 - \Phi_6 - 2\Phi_7\},$$

$$\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 2\right) =$$

$$= \sqrt{\frac{3}{140}}\left\{2\Phi_8 + 3\Phi_9 + \Phi_{10} - 4\Phi_{11} + 4\Phi_{12} + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{13}\right\}.$$

Для того чтобы решить задачу, нам необходимо еще определить функции $\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 2\right)$ и $\Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 2\right)$.

Так как $\Phi\left({}^4F, \frac{3}{2}, 3\right) = \Phi_{14}$, то, действуя оператором $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$, получим состояние $\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 3\right)$:

$$\begin{aligned} (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi\left({}^4F, \frac{3}{2}, 3\right) &= \sqrt{3}\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 3\right) = (\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\Phi_{14}, \\ \Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 3\right) &= \frac{1}{\sqrt{3}}\{\Phi_5 + \Phi_6 + \Phi_7\}. \end{aligned}$$

А из состояния $\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 3\right)$ посредством оператора $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$ получаем состояние $\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 2\right)$:

$$\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{11}\}.$$

Волновая функция $\Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 3\right)$ определится из условия ортогональности ее к трем функциям $\Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 3\right)$, $\Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 3\right)$, $\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 3\right)$. Нормированная функция $\Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 3\right)$, определенная из этих условий, равна

$$\Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 3\right) = \frac{1}{\sqrt{12}}\{-\sqrt{6}\Phi_4 + \Phi_5 + \Phi_6 - 2\Phi_7\}.$$

И, наконец,

$$\Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{12}}\{-2\Phi_8 + \Phi_9 - \Phi_{10} + \sqrt{6}\Phi_{13}\}.$$

Теперь мы имеем четыре состояния с $M_S = \frac{1}{2}$ и $M_L = 2$,

$$\begin{aligned} \Phi\left({}^2H, \frac{1}{2}, 2\right) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{30}}\{\Phi_8 - \Phi_9 + 3\Phi_{10} - 2\Phi_{11} - 3\Phi_{12} + \sqrt{6}\Phi_{13}\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi\left({}^2G, \frac{1}{2}, 2\right) &= \\ &= \sqrt{\frac{3}{140}}\{2\Phi_8 + 3\Phi_9 + \Phi_{10} - 4\Phi_{11} + 4\Phi_{12} + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{13}\}, \end{aligned}$$

$$\Phi\left({}^4F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{\Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{11}\},$$

$$\Phi\left({}^2F, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{\sqrt{12}} \{-2\Phi_8 + \Phi_9 - \Phi_{10} + \sqrt{6}\Phi_{13}\}.$$

В эту же группу входят еще два 2D состояния. Эти два взаимно ортогональные 2D состояния ортогональны также к написанным выше четырем состояниям.

Из условий ортогональности и нормировки получаем следующие ортонормированные функции:

$$\Phi\left({}^a2D, \frac{1}{2}, 2\right) = \frac{1}{2} \{-\Phi_8 - \Phi_9 + \Phi_{10} + \Phi_{12}\},$$

$$\begin{aligned} \Phi\left({}^b2D, \frac{1}{2}, 2\right) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{84}} \{-5\Phi_8 + 3\Phi_9 + \Phi_{10} - 4\Phi_{11} - 3\Phi_{12} - 2\sqrt{6}\Phi_{13}\}. \end{aligned}$$

Остальные волновые функции 2D состояний, соответствующие другим значениям проекции моментов, легко определяются посредством последовательного применения операторов $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$ и $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$.

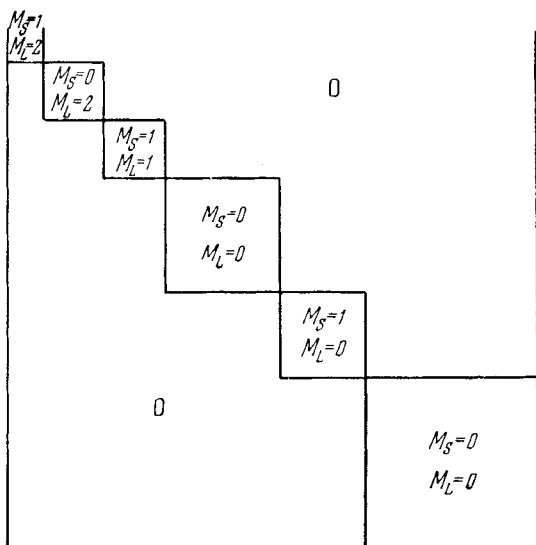
44. Составим сперва список всех состояний, принадлежащих конфигурации $ppn'p$. Ограничимся неотрицательными значениями M_S и M_L

| pp | | M_S | |
|-------|---|--|---|
| | | 1 | 0 |
| M_L | 2 | $\Phi_1(1^+, 1^+)$ | $\Phi_2(1^+, 1^-)$ $\Phi_3(1^-, 1^+)$ |
| | 1 | $\Phi_4(1^+, 0^+)$ $\Phi_5(0^+, 1^+)$ | $\Phi_6(1^+, 0^-)$ $\Phi_7(0^+, 1^-)$ $\Phi_8(1^-, 0^+)$ $\Phi_9(0^-, 1^+)$ |
| | 0 | $\Phi_{10}(1^+, -1^+)$ $\Phi_{11}(0^+, 0^+)$ $\Phi_{12}(-1^+, 1^+)$ | $\Phi_{13}(1^+, -1^-)$ $\Phi_{14}(0^+, 0^-)$ $\Phi_{15}(-1^+, 1^-)$ $\Phi_{16}(1^-, -1^+)$ $\Phi_{17}(0^-, 0^+)$ $\Phi_{18}(-1^-, 1^+)$ |

Из рассмотрения таблицы следует, что данная конфигурация имеет термы 1S , 3S , 1P , 3P , 1D и 3D .

При решении задачи в качестве функций нулевого приближения возьмем функции, указанные в таблице.

Так как энергия не зависит от значения проекций M_S и M_L , то матрица возмущения будет представлена в виде субматриц следующим образом:



Обозначим через \hat{V} оператор возмущения. В первой субматрице присутствует только терм 3D . Следовательно,

$$E^{(1)}({}^3D) = V_{11}.$$

Во второй субматрице ($M_L = 2$, $M_S = 0$) комбинируются два терма 3D и 1D ,

$$E^{(1)}({}^3D) + E^{(1)}({}^1D) = V_{22} + V_{33}.$$

В третьей субматрице ($M_L = 1$, $M_S = 0$) комбинируются два терма 3D и 3P ,

$$E^{(1)}({}^3D) + E^{(1)}({}^3P) = V_{44} + V_{55}.$$

В четвертой субматрице ($M_L = 1, M_S = 0$) четыре термина: ${}^3D, {}^1D, {}^3P, {}^1P$,

$$E^{(1)}({}^3D) + E^{(1)}({}^1D) + E^{(1)}({}^3P) + E^{(1)}({}^1P) = V_{66} + V_{77} + V_{88} + V_{99}.$$

В пятой субматрице ($M_L = 0, M_S = 1$) три термина: ${}^3D, {}^3P, {}^3S$,

$$E^{(1)}({}^3D) + E^{(1)}({}^3P) + E^{(1)}({}^3S) = V_{10,10} + V_{11,11} + V_{12,12}.$$

И, наконец, в шестой ($M_L = 0, M_S = 0$) все термины: ${}^3D, {}^3P, {}^3S, {}^1D, {}^1P, {}^1S$,

$$\begin{aligned} E^{(1)}({}^3D) + E^{(1)}({}^1D) + E^{(1)}({}^3P) + \\ + E^{(1)}({}^1P) + E^{(1)}({}^3S) + E^{(1)}({}^1S) = \\ = V_{13,13} + V_{14,14} + V_{15,15} + V_{16,16} + V_{17,17} + V_{18,18}. \end{aligned}$$

Из этих уравнений легко получить выражение для термов через диагональные матричные элементы:

$$E^{(1)}({}^3D) = V_{11},$$

$$E^{(1)}({}^1D) = V_{22} + V_{33} - V_{11},$$

$$E^{(1)}({}^3P) = V_{44} + V_{55} - V_{11},$$

$$E^{(1)}({}^1P) = V_{66} + V_{77} + V_{88} + V_{99} + V_{11} - V_{22} - V_{33} - V_{44} - V_{55}$$

и т. д.

46. Выражение $\frac{e\hbar}{2\mu c}(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)\mathcal{H}$ является малым возмущением. Рассматриваем рассель-саундеровский тип связи. В этом случае \hat{H}_0 коммутирует с операторами $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$. Уровни энергии невозмущенного состояния характеризуются квантовыми числами J, L, S . Каждый из этих уровней вырожден по направлению вектора \hat{J} , кратность этого вырождения равна $2J + 1$.

Так как недиагональные по \hat{J}_z матричные элементы оператора $(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$ равны нулю, то поправка к энергии равна просто среднему значению оператора $(\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)$ в состоянии, характеризуемом квантовыми числами J, J_z, L, S .

С целью вычисления этого среднего значения положим в формуле (задачи 29 § 4) $g_1 = 1$, $g_2 = 2$, $\hat{J}_1 = \hat{L}$, $\hat{J}_2 = \hat{S}$. В результате получим:

$$\overline{\hat{L}_z + 2\hat{S}_z} = J_z \left\{ \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \right\} = J_z g.$$

Согласно сказанному выше искомое расщепление будет равно

$$E_{JLS}^{(1)} = \frac{e\hbar\mathcal{H}}{2\mu c} g J_z.$$

51. Энергия атома в магнитном поле одного порядка со спин-орбитальным взаимодействием. Поэтому оператор спин-орбитального взаимодействия, равный $\varphi(r) \hat{l} \hat{s}$ (см. задачу 10 § 7), объединяем с оператором $\frac{e\hbar}{2\mu c} (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z)$ и их сумму

$$V = \varphi(r) \hat{l} \hat{s} + \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z)$$

рассматриваем как малое возмущение. В невозмущенном состоянии сохраняющимися величинами будут квадрат и проекция орбитального момента, а также квадрат и проекция спина. Нам удобнее взять другой набор сохраняющихся величин. Будем характеризовать стационарное невозмущенное состояние квантовыми числами n, l, j, m_j ($\hat{l}^2, \hat{j}^2, \hat{j}_z$ коммутируют с H_0). Степень вырождения в случае кулоновского поля равна $2n^2$, в случае центрально-симметричного произвольного поля $2(2l+1)$. Нам нет необходимости решать секулярное уравнение такой высокой степени. Заметим, что в возмущенном состоянии квадрат орбитального момента и проекция полного момента являются интегралами движения. Вследствие этого волновая функция возмущенной задачи должна быть скомбинирована из функций

$$\psi_{nljm_j}^{(0)},$$

относящихся к одним и тем же значениям n, l, m_j , т. е.

$$\psi = c_1 \psi^{(0)} \left(n, l, j = l - \frac{1}{2}, m_j \right) + c_2 \psi^{(0)} \left(n, l, j = l + \frac{1}{2}, m_j \right)$$

или в другой форме

$$\psi = c_1 \frac{R_{nl}^{(0)}}{\sqrt{2l+1}} \left(\begin{array}{c} \sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j^{-1/2}} \\ \sqrt{l-m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j^{+1/2}} \end{array} \right) + \\ + c_2 \frac{R_{nl}^{(0)}}{\sqrt{2l+1}} \left(\begin{array}{c} \sqrt{l-m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j^{-1/2}} \\ -\sqrt{l+m_j+\frac{1}{2}} Y_{l, m_j^{+1/2}} \end{array} \right).$$

Матричные элементы оператора \hat{V} равны

$$(\hat{V})_{nlj=l+1/2m_j}^{nlj=l+1/2m_j} = A \frac{l}{2} + \mathcal{H} \mu_0 m_j \left(1 + \frac{1}{2l+1} \right), \\ (\hat{V})_{nlj=l-1/2m_j}^{nlj=l-1/2m_j} = -A \frac{l+1}{2} + \mathcal{H} \mu_0 m_j \left(1 - \frac{1}{2l+1} \right), \\ (\hat{V})_{nlj=l-1/2m_j}^{nlj=l+1/2m_j} = (\hat{V})_{nlj=l+1/2m_j}^{nlj=l-1/2m_j} = \frac{\mathcal{H} \mu_0}{2l+1} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2},$$

где

$$A = \int_0^\infty R_{nl}(r) \varphi(r) R_{nl}(r) r^2 dr, \quad \text{а} \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2\mu c}.$$

Значение энергии E находится из решения секулярного уравнения

$$\left| \begin{array}{c} E_{nl}^0 + A \frac{l}{2} + \mathcal{H} \mu_0 m_j \left(1 + \frac{1}{2l+1} \right) - E, \\ \frac{\mathcal{H} \mu_0}{2l+1} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2}, \\ \frac{\mathcal{H} \mu_0}{2l+1} \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} \\ E_{nl}^{(0)} - A \frac{l+1}{2} + \mathcal{H} \mu_0 m_j \left(1 - \frac{1}{2l+1} \right) - E \end{array} \right| = 0.$$

Обозначим через E_+ и E_- энергию одноэлектронного атома с учетом спин-орбитального взаимодействия, причем E_+ относится к состоянию с $j=l+1/2$, а E_- с $j=l-1/2$.

Как следует из решения задачи 10 § 7,

$$E_+ = E_{nl}^{(0)} + A \frac{l}{2}, \quad E_- = E_{nl}^{(0)} - A \frac{l+1}{2}.$$

Решая секулярное уравнение, находим значение E :

$$E = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) + \mathcal{H}\mu_0 m_j \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_+ - E_-)^2 + \mathcal{H}\mu_0 \frac{m_j}{2l+1}(E_+ - E_-) + \frac{1}{4}\mathcal{H}^2\mu_0^2}.$$

Рассмотрим предельные случаи.

а) В случае слабых полей, т. е. при $\mu_0\mathcal{H} \ll E_+ - E_-$ для энергии получаем следующие выражения:

$$E = E_+ + \mathcal{H}\mu_0 m_j \frac{2l+2}{2l+1},$$

$$E = E_- - \mathcal{H}\mu_0 m_j \frac{2l}{2l+1}.$$

Первое значение энергии соответствует энергии n -го уровня состояния с $j = l + 1/2$, а второе с $j = l - 1/2$ (см. задачу 46 § 7).

б) В случае сильных полей, т. е. при $\mu_0\mathcal{H} \gg E_+ - E_-$

$$E = \frac{1}{2}(E_+ + E_-) + \mathcal{H}\mu_0 m_j \pm \frac{1}{2}\mathcal{H}\mu_0 \pm \frac{m_j}{2l+1}(E_+ - E_-).$$

Обозначим через E_c энергию центра тяжести уровней в отсутствии поля, т. е.

$$E_c = \frac{E_+(l+1) - E_-l}{2l+1}$$

(статистические веса состояний с E_+ и E_- относятся друг к другу как $\frac{2l+1}{2l}$), а через ΔE разность $E_+ - E_-$. В новых обозначениях E будет иметь вид

$$E = E_c + \mathcal{H}\mu_0 \left(m_j \pm \frac{1}{2}\right) \pm \frac{\Delta E}{2l+1} \left(m_j \mp \frac{1}{2}\right).$$

Это выражение, как легко убедиться, тождественно с выражением задачи 53 § 7.

Верхний знак соответствует состоянию с $m_l = m_j - 1/2$, $m_s = 1/2$, а нижний — состоянию с $m_l = m_j + 1/2$, $m_s = -1/2$.

$$52. c_1 = \sqrt{\frac{1}{2}(1+\gamma)}, \quad c_2 = \sqrt{\frac{1}{2}(1-\gamma)} \text{ для верхнего уровня,}$$

$$c_1 = \sqrt{\frac{1}{2}(1-\gamma)}, \quad c_2 = -\sqrt{\frac{1}{2}(1+\gamma)} \text{ для нижнего уровня,}$$

где

$$\gamma = \frac{\frac{1}{2} \Delta E + \frac{m_j}{2l+1} \mathcal{H} \mu_0}{\sqrt{\frac{1}{4} (\Delta E)^2 + \frac{m_j}{2l+1} \Delta E \mathcal{H} \mu_0 + \frac{1}{4} \mathcal{H}^2 \mu_0^2}}.$$

Исследуем предельные случаи.

а) Магнитное поле исчезающе мало, т. е. $\Delta E \gg \mathcal{H} \mu_0$, тогда $\gamma \approx 1$. Для верхнего уровня будем иметь $c_1 = 1$, $c_2 = 0$, для нижнего $c_1 = 0$, $c_2 = 1$.

б) Сильное магнитное поле $\Delta E \ll \mathcal{H} \mu_0$. В этом случае

$$\gamma = \frac{m_j}{l + \frac{1}{2}} \text{ и}$$

$$c_1 = \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \quad c_2 = \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \text{ для верхнего уровня,}$$

$$c_1 = \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}}, \quad c_2 = -\sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \text{ для нижнего уровня.}$$

Подставляя полученные значения c_1 и c_2 в выражение для волновых функций (см. задачу 51 § 7), находим:

$$\psi = R_{nl}^{(0)} \begin{pmatrix} Y_{l, m-1/2}(\vartheta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ для верхнего уровня,}$$

$$\psi = R_{nl}^{(0)} \begin{pmatrix} 0 \\ Y_{l, m-1/2}(\vartheta, \varphi) \end{pmatrix} \text{ для нижнего уровня.}$$

53. Так как энергия в магнитном поле значительно превышает энергию спин-орбитального взаимодействия, то в первом приближении последним взаимодействием пренебрежем.

В этом случае \hat{l}_z и \hat{s}_z — величины сохраняющиеся, и энергия расщепления определяется формулой

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} (m_l + 2m_s).$$

Во втором приближении учтем спин-орбитальное взаимодействие. Мультиплетное расщепление, накладываемое на расщепление в магнитном поле, определяется средним значением оператора $\frac{e^2}{2\mu^2c^2} \frac{1}{r^3} (\hat{l}\hat{s})$ (см. задачу 10 § 7) по состоянию с данными значениями m_l и m_s . При заданном значении одной из компонент момента средние значения двух других равны нулю, поэтому

$$\overline{\hat{l}\hat{s}} = m_l m_s.$$

Таким образом, энергия расщепления уровней с учетом спин-орбитального взаимодействия имеет вид

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} (m_l + 2m_s) + \frac{e^2\hbar^2}{2\mu^2c^2} \frac{\bar{1}}{r^3} m_l m_s.$$

Подставим в полученную формулу значение $\frac{\bar{1}}{r^3}$, выраженное через энергию расщепления тонкой структуры в отсутствии поля. Как легко показать (см. задачу 10 § 7),

$$\frac{e^2\hbar^2}{2\mu^2c^2} \frac{\bar{1}}{r^3} = \frac{E_{n,l,j=l+1/2} - E_{n,l,j=l-1/2}}{l + \frac{1}{2}} = \frac{\Delta E}{l + \frac{1}{2}}.$$

Окончательно для $E^{(1)}$ имеем выражение

$$E^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H} (m_l + 2m_s) + \frac{\Delta E}{l + \frac{1}{2}} m_l m_s.$$

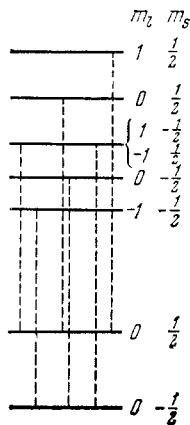


Рис. 30.

На рисунке 30 дана схема расщепления $1s$ и $2p$ термов атома щелочного металла в сильном магнитном поле.

54. Энергия возмущения в данном случае равна

$$\hat{V} = \frac{e\hbar}{\mu c} \beta \frac{1}{r^3} \hat{i} \left\{ \frac{3(\hat{r}\hat{s})}{r^2} - \hat{s} \right\} + \frac{e\hbar}{\mu c} \mathcal{H} \hat{s}_z + \beta \mathcal{H} \hat{i}_z.$$

В этом выражении последним членом пренебрежем ввиду малости магнитного момента ядра по сравнению с магнитным моментом электрона ($\beta < \frac{e\hbar}{2\mu c}$).

Поступая так же, как и при решении задачи 51 § 7, находим секулярное уравнение:

$$\begin{vmatrix} E_+ + \frac{\mu_0 \mathcal{H} m_f}{i + \frac{1}{2}} - E & \frac{\mathcal{H} \mu_0}{i + \frac{1}{2}} \sqrt{\left(i + \frac{1}{2}\right)^2 - m_f^2} \\ \frac{\mathcal{H} \mu_0}{i + \frac{1}{2}} \sqrt{\left(i + \frac{1}{2}\right)^2 - m_f^2} & E_- - \frac{\mathcal{H} \mu_0}{i + \frac{1}{2}} m_f - E \end{vmatrix} = 0.$$

Здесь E_+ и E_- — энергия терма с учетом сверхтонкой структуры, причем E_+ относится к состоянию с $f = i + 1/2$, а E_- с $f = i - 1/2$, m_f — проекция полного момента ($m_f = f, f - 1, \dots, -f$), а $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2\mu c}$. Решая секулярное уравнение, находим:

$$E = \frac{E_+ + E_-}{2} \pm \frac{\Delta E}{2} \sqrt{1 + \frac{2\xi}{i + \frac{1}{2}} m_f + \xi^2},$$

где $\Delta E = E_+ - E_-$, а $\xi = \frac{2\mu_0 \mathcal{H}}{\Delta E}$.

Найдем порядок величины напряженности магнитного поля, в котором будет наблюдаться расщепление, описываемое полученной формулой. По условию $\mathcal{H} \sim \frac{|\Delta E_{ff'}|}{\mu_0}$. В случае атома натрия $\Delta E_{ff'} = 0,0583 \text{ см}^{-1} = 1,962 \cdot 10^{-16} \text{ эрг}$; так как $\mu_0 = 0,922 \cdot 10^{-20} \text{ гаусс} \cdot \text{см}^3$, то напряженность \mathcal{H} по порядку должна быть равна $\mathcal{H} \sim 600 \text{ гаусс}$.

Рассмотрим предельные случаи.

а) В случае малых полей, т. е. при $\mu_0 \mathcal{H} \ll \Delta E$, для энергии получаем следующие выражения:

$$E = E_+ + \frac{\mathcal{H} \mu_0}{i + \frac{1}{2}} m_f,$$

$$E = E_- - \frac{\mathcal{H} \mu_0}{i + \frac{1}{2}} m_f.$$

б) В случае больших полей, т. е. при $\mathcal{H} \mu_0 \gg \Delta E$,

$$E = \frac{1}{2} (E_+ + E_-) \pm \mathcal{H} \mu_0.$$

57. Собственные нормированные функции атома водорода в невозмущенном состоянии имеют вид (см. задачу 20 § 4)

$$\left. \begin{aligned} \psi_{nlj=l+1/2m_j} &= \frac{R_{n,j-1/2}}{\sqrt{2j}} \left(\frac{V^{j+m_j}}{V^{j-m_j}} Y_{j-1/2, m_j-1/2} \right) = u_-, \\ \psi_{nlj=l-1/2m_j} &= \frac{R_{n,j+1/2}}{\sqrt{2j+2}} \left(\frac{V^{j+1-m_j}}{-V^{j+1+m_j}} Y_{j+1/2, m_j-1/2} \right) = u_+. \end{aligned} \right\} (1)$$

Энергия определяется двумя квантовыми числами n, j . В присутствии однородного электрического поля ($\mathcal{E}_x = \mathcal{E}_y = 0$, $\mathcal{E}_z = \mathcal{E}$) \hat{j}_z по-прежнему остается константой движения, а орбитальный момент перестает быть интегралом движения. Матричные элементы оператора возмущения $\hat{V} = e\mathcal{E}z$ для переходов между состояниями с различными значениями m_j равны нулю. Равны нулю также диагональные элементы оператора \hat{V} , т. е.

$$\sum_{\sigma} \int u_+^* z u_+ d\tau = \sum_{\sigma} \int u_-^* z u_- d\tau. \quad (2)$$

Поэтому для определения расщепления необходимо вычислить матричные элементы \hat{V} , соответствующие переходу из состояния $n, j, m_j, l = j + 1/2$ в состояние $n, j, m_j, l = j - 1/2$. Искомый матричный элемент равен

$$\begin{aligned} V_{21} = V_{12} &= e\mathcal{E} \sum_{\sigma} \int u_-^* z u_+ d\tau = \\ &= \int_0^{\infty} r^3 R_{n,j-1/2}(r) R_{n,j+1/2}(r) dr \frac{1}{2V^{j(j+1)}} \times \\ &\quad \times \{ V^{(j+m_j)(j-m_j+1)} \times \\ &\quad \times \int Y_{j-1/2, m_j-1/2}^* Y_{j+1/2, m_j-1/2} \cos \vartheta d\Omega - V^{(j-m_j)(j+m_j+1)} \times \\ &\quad \times \int Y_{j-1/2, m_j+1/2}^* Y_{j+1/2, m_j+1/2} \cos \vartheta d\Omega \}. \quad (3) \end{aligned}$$

Проинтегрируем сперва по углам. На основании формулы

$$\begin{aligned} \cos \vartheta Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = & \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m}(\vartheta, \varphi) + \\ & + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m}(\vartheta, \varphi) \end{aligned}$$

получаем, что выражение в фигурной скобке в (3) равно

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\sqrt{j(j+1)}} \{(j+m_j)(j-m_j+1) - (j+m_j+1)(j-m_j)\} = \\ = \frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}}. \end{aligned}$$

Производя далее интегрирование по r , имеем:

$$-\frac{3}{2} n \sqrt{n^2 - \left(j + \frac{1}{2}\right)^2}.$$

Таким образом, для матричного элемента возмущения (3) окончательно получаем:

$$-\frac{3}{4} n \frac{\sqrt{n^2 - \left(j + \frac{1}{2}\right)^2}}{j(j+1)} m_j e^{\mathcal{E}} = V_{12} = V_{21}.$$

Искомую поправку к энергии находим из решения векового уравнения:

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} -\varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & -\varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad \varepsilon = \pm V_{12}, \\ \varepsilon = \pm \frac{3}{4} \sqrt{n^2 - \left(j + \frac{1}{2}\right)^2} \frac{nm_j}{j(j+1)} e^{\mathcal{E}}. \end{aligned}$$

При заданном n терм с $j = n - 1/2$ в электрическом поле не расщепляется, так как он не вырожден относительно квантового числа l (l имеет фиксированное значение $l = j - 1/2 = n - 1$). Все остальные термы тонкой структуры распадаются на $2j + 1$ равноотстоящих уровней $m_j = -j, \dots, \dots, +j$).

58.

$$\mu_0 = \frac{e\hbar}{2\mu c} \frac{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2}{j(j+1)} m_j.$$

59. В рассматриваемом случае спин-орбитальное взаимодействие V_1 , релятивистская поправка на изменение массы V_2 и энергия электрона во внешнем однородном электрическом поле $V_3 = -Fz$ — величины одного и того же порядка. Поэтому мы будем рассматривать их сумму как малое возмущение исходной системы. При вычислении исходим из состояний, в которых имеют вполне определенные значения орбитальный момент L , его проекция m_l и проекция спина m_s на направление электрического поля (ось z).

Вычисляя матричные элементы величин V_1 , V_2 и V_3 , имеем (в ат. ед.):

$$(V_1)_{lm_l}^{l'm_l'} = \begin{cases} \frac{1}{2} \alpha^2 \frac{m_l(m - m_l)}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \delta_{ll'} & \text{при } m_l' = m_l, \\ \frac{1}{4} \alpha^2 \frac{\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - m^2}}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)} \delta_{ll'} & \text{при } m_l' = m_l \pm \frac{1}{2}, \\ m_l = m_l - \frac{1}{2} \text{ или наоборот,} \\ 0 & \text{во всех остальных случаях,} \end{cases}$$

$$(V_2)_{lm_l}^{l'm_l'} = -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \delta_{ll'} \delta_{m_l m_l'},$$

$$(V_3)_{lm_l}^{l'm_l'} = -\frac{3n}{2} \sqrt{\frac{(n^2 - l^2)(l^2 - m_l^2)}{4l^2 - 1}} F \delta_{l'l-1} \delta_{m_l' m_l}.$$

В случае $n = 2$ энергия состояний с квантовыми числами $l = 1$, $m = m_l + m_s = \pm 3/2$ ($j = 3/2$) в электрическом поле не изменяется. Смещение этого уровня вследствие учета V_1 и V_2 равно $\frac{\alpha^2}{128}$ ат. ед. (см. задачу 10 § 7).

Расщепление уровня, квантовые числа которого $n=2$, $m = \pm \frac{1}{2}$, находится из решения секулярного уравнения

$$\begin{vmatrix} -\frac{11}{4}\delta - E^{(1)} & \delta\sqrt{2} & 0 \\ \delta\sqrt{2} & -\frac{7}{4}\delta - E^{(1)} & -3F \\ 0 & -3F & -\frac{15}{4}\delta - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

где $3\delta = \frac{\alpha^2}{32}$ ат. ед. есть расщепление тонкой структуры уровня $n=2$ в отсутствие внешнего поля. Введем в это уравнение величину ε , связанную с $E^{(1)}$ соотношением $E^{(1)} = \varepsilon - \frac{11}{4}\delta$ ($-\frac{11}{4}\delta$ представляет энергию центра тяжести трех энергетических уровней $\frac{E_1^{(1)} + E_2^{(1)} + E_3^{(1)}}{3} = -\frac{11}{4}\delta$), получаем:

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon & \delta\sqrt{2} & 0 \\ \delta\sqrt{2} & \delta - \varepsilon & -3F \\ 0 & -3F & -\delta - \varepsilon \end{vmatrix} = 0,$$

или

$$\varepsilon^3 - \varepsilon(3\delta^2 + 9F^2) - 2\delta^3 = 0.$$

Решаем последнее уравнение в случае слабых полей ($F \ll \delta$) и в случае сильных полей ($F \gg \delta$). В первом случае получаем:

$$\varepsilon_1 = -\delta - \sqrt{3}F - \frac{F^2}{\delta},$$

$$\varepsilon_2 = -\delta + \sqrt{3}F - \frac{F^2}{\delta},$$

$$\varepsilon_3 = 2\delta + 2\frac{F^2}{\delta}.$$

Во втором:

$$\varepsilon_1 = -3F - \frac{1}{2}\frac{\delta^2}{F} + \frac{1}{9}\frac{\delta^3}{F^2},$$

$$\varepsilon_2 = -\frac{2}{9}\frac{\delta^3}{F^2},$$

$$\varepsilon_3 = 3F + \frac{1}{2}\frac{\delta^2}{F} + \frac{1}{9}\frac{\delta^3}{F^2}.$$

60. Среднее значение полной энергии равно

$$\bar{H} = \frac{\int \psi_0^* (1 + \lambda u) \hat{H} \psi_0 (1 + \lambda u) d\tau}{\int \psi_0^* \psi_0 (1 + \lambda u)^2 d\tau}. \quad (1)$$

С помощью интегрирования по частям приведем числитель к более удобной форме.

Оператор кинетической энергии электронов имеет вид

$$\hat{T} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \Delta_i,$$

где n — число электронов, а Δ_i — оператор Лапласа, действующий на координаты i -го электрона. (Расчет производим в атомной системе единиц.) Запишем выражение для среднего значения кинетической энергии в симметричной относительно ψ_0^* и ψ_0 форме

$$\begin{aligned} \bar{T} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \int \{ \psi_0^* (1 + \lambda u) \Delta_i (1 + \lambda u) \psi_0 + \\ + \psi_0 (1 + \lambda u) \Delta_i (1 + \lambda u) \psi_0^* \} d\tau. \end{aligned}$$

Выполняя дифференцирование под знаком интеграла, получим:

$$\begin{aligned} \bar{T} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \int \{ \psi_0^* (1 + \lambda u)^2 \Delta_i \psi_0 + \\ + \psi_0 (1 + \lambda u)^2 \Delta_i \psi_0^* + 2\lambda \psi_0 \psi_0^* (1 + \lambda u) \Delta_i u + \\ + 2\lambda (1 + \lambda u) \nabla_i (\psi_0^* \psi_0) \nabla_i u \} d\tau. \quad (2) \end{aligned}$$

Преобразуем два последние члена. Для этого рассмотрим тождество

$$\begin{aligned} \nabla_i \{ \psi_0^* \psi_0 (1 + \lambda u) \nabla_i u \} = \\ = \psi_0^* \psi_0 (1 + \lambda u) \Delta_i u + (1 + \lambda u) \nabla_i (\psi_0^* \psi_0) \nabla_i u + \lambda \psi_0^* \psi_0 (\nabla_i u)^2. \quad (3) \end{aligned}$$

При интегрировании тождества (3) по всему конфигурационному пространству имеем:

$$\begin{aligned} \int \{ \psi_0^* \psi_0 (1 + \lambda u) \Delta_i u + (1 + \lambda u) \nabla_i (\psi_0^* \psi_0) \nabla_i u \} d\tau = \\ = -\lambda \int \psi_0^* \psi_0 (\nabla_i u)^2 d\tau. \quad (4) \end{aligned}$$

Подставляя (4) в (2), получим:

$$\bar{T} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \int \{ \psi_0^* (1 + \lambda u)^2 \Delta_i \psi_0 + \psi_0 (1 + \lambda u)^2 \Delta_i \psi_0^* \} d\tau + \\ + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i=1}^n \int \psi_0^* \psi_0 (\nabla_i u)^2 d\tau.$$

Оператор Гамильтона \hat{H} равен $\hat{H} = \hat{H}_0 + u = \hat{T} + \hat{V} + u$. Учитывая коммутативность \hat{V} с $(1 + \lambda u)$, выражение (1) представим в следующей форме:

$$\bar{H} = E_0 + \frac{\frac{1}{2} \int (1 + \lambda u)^2 (\psi_0^* \hat{H} \psi_0 + \psi_0 \hat{H} \psi_0^*) d\tau + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i=1}^n \int \psi_0^* \psi_0 (\nabla_i u)^2 d\tau}{\int (1 + \lambda u)^2 \psi_0^* \psi_0 d\tau}.$$

Так как $\hat{H}_0 \psi_0 = E_0 \psi_0$, то

$$\bar{H} = E_0 + \frac{\int \psi_0^* u (1 + \lambda u)^2 \psi_0 d\tau + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i=1}^n \int \psi_0^* \psi_0 (\nabla_i u)^2 d\tau}{\int (1 + \lambda u)^2 \psi_0^* \psi_0 d\tau}$$

или

$$\bar{H} = E_0 + \frac{(u)_{00} + 2\lambda (u^2)_{00} + \lambda^2 (u^3)_{00} + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i=1}^n \{ (\nabla_i u)^2 \}_{00}}{1 + 2\lambda (u)_{00} + \lambda^2 (u^2)_{00}}, \quad (5)$$

где $(u)_{00} = \int \psi_0^* u \psi_0 d\tau$, $(u^2)_{00} = \int \psi_0^* u^2 \psi_0 d\tau$ и т. д. Разложим второй член в (5) в ряд, отбросив члены с $(u^3)_{00}$, $(u)_{00}^3$ и т. д.

Для добавки к энергии ΔE получим приближенное выражение вида

$$\Delta E \approx (u)_{00} + 2\lambda (u^2)_{00} - 2\lambda (u)_{00}^2 + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i=1}^n \{ (\nabla_i u)^2 \}_{00}. \quad (6)$$

Определим значение вариационного параметра λ из условия

$$\frac{d\Delta E}{d\lambda} = 2 (u^2)_{00} - 2 (u)_{00}^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \{ (\nabla_i u)^2 \}_{00} = 0,$$

откуда для λ получаем значение

$$\lambda = 2 \frac{(u)_{00}^2 - (u^2)_{00}}{\sum_{i=1}^n \{(\nabla_i u)^2\}_{00}}.$$

Подставляя λ в (6), получим искомое соотношение

$$\Delta E \approx (u)_{00} - 2 \frac{\{(u)_{00}^2 - (u^2)_{00}\}^2}{\sum_{i=1}^n \{(\nabla_i u)^2\}_{00}}. \quad (7)$$

61. Если атом находится в однородном электрическом поле, напряженность которого \mathcal{E} , и поле направлено по оси z , то оператор возмущения

$$u = -\mathcal{E} \sum_{i=1}^n z_i = -\mathcal{E} z.$$

Матричный элемент $(u)_{00}$ равен нулю.

На основании формулы (7) предыдущей задачи имеем

$$\Delta E \approx -2\mathcal{E}^2 \frac{\{(z^2)_{00}\}}{n},$$

где n — число электронов.

Отсюда следует, что коэффициент поляризуемости равен

$$\alpha = \frac{4 \{(z^2)_{00}\}^2}{n}.$$

Необходимо отметить, что эта формула, полученная путем введения только одного вариационного параметра λ , представляет удовлетворительное приближение лишь для атома водорода и гелия. В случае атомов с несколькими электронными оболочками деформации оболочек будут не одинаковы. Следовательно, в вариационном методе для получения более удовлетворительного результата мы должны для каждой электронной оболочки ввести свой вариационный параметр λ .

Для атома водорода

$$(z^2)_{00} = \frac{1}{3} (r^2)_{00} = \frac{1}{3} \frac{4\pi}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-2r} r^4 dr = 1$$

и, следовательно,

$$\alpha = 4 \text{ ат. ед.}$$

В системе CGSE

$$\alpha = 4 \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \right) \text{ см}^3.$$

Для атома гелия волновую функцию основного состояния возьмем в виде

$$\psi_0 = \frac{Z_{\text{эфф}}^3}{\pi} e^{-Z_{\text{эфф}}(r_1+r_2)}, \text{ где } Z_{\text{эфф}} = \frac{27}{16} \text{ (см. задачу 14 § 7).}$$

Произведя вычисления, получим:

$$\alpha = 0,98 \text{ ат. ед. или } \alpha = 0,98 \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \right)^3 \text{ см}^3.$$

Для найденного значения α величина диэлектрической постоянной гелия при нормальных условиях будет равна

$$\epsilon = 1,00049.$$

Экспериментальное значение $\epsilon_{\text{эксп}} = 1,00074$.

Сравнительно большое различие между вычисленным значением и экспериментальным объясняется главным образом тем, что мы пользовались грубой аппроксимацией для невозмущенной функции.

62. а)

$$E^{(1)} = \frac{m_j}{8j(j+1)} \frac{e\hbar}{\mu c} \left\{ (2j+1)^2 \mathcal{H} \pm \sqrt{(2j+1)^2 \mathcal{H}^2 + \frac{36n^2}{\alpha^2} \left\{ n^2 - \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \right\} \mathcal{E}^2} \right\} \\ \left(\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \right)$$

(см. задачи 57, 59 § 7);

б)

$$E^{(1)} \left(n = 2, m_j = \pm \frac{3}{2} \right) = -\frac{\alpha^2}{128} \left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \right) \pm \frac{e\hbar}{\mu c} \mathcal{H},$$

$$E^{(1)} \left(n = 2, m_j = \pm \frac{1}{2} \right) = \epsilon - \frac{11}{384} \alpha^2 \left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \right),$$

где ϵ определяется из решения уравнения третьей степени

$$\epsilon^3 \mp 2\beta\epsilon^2 - \epsilon(3\delta^2 + 9F^2 - \beta^2) \pm 2\delta^2\beta - 2\delta^3 = 0.$$

Здесь $\beta = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}$, $F = e\mathcal{E} \left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \right)$, $\delta = \frac{\alpha^2}{96} \left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \right)$.

В случае сильных полей ($\delta \ll F$ $\delta \ll \beta$)

$$\varepsilon_1 = \pm \beta - 3F - \frac{1}{2} \frac{9F \mp \beta}{9F^2 \mp 3F\beta} \delta^2,$$

$$\varepsilon_2 = \pm \frac{2\beta}{9F^2 - \beta^2} \delta^2,$$

$$\varepsilon_3 = \pm \beta + 3F + \frac{1}{2} \frac{9F \pm \beta}{9F^2 \pm 3F\beta} \delta^2$$

(см. задачу 59 § 7).

63. Направим ось z вдоль направления магнитного поля, а ось x вдоль электрического поля. Тогда для оператора потенциальной энергии электрона в этих полях получим

$$\omega = \frac{e\hbar}{2\mu c} (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) \mathcal{H} + e\mathcal{E}x.$$

Последнее выражение будем рассматривать как малое возмущение, характеризуя невозмущенное стационарное состояние квантовыми числами n , l , m , σ (m и σ — проекции орбитального и спинового моментов на ось z). Отличные от нуля матричные элементы x имеют вид

$$\begin{aligned} (x)_{l, m-1}^{l-1, m} &= (x)_{l-1, m}^{l, m-1} = \frac{3}{4} n \sqrt{\frac{(n^2 - l^2)(l - m + 1)(l - m)}{(2l + 1)(2l - 1)}} a, \\ (x)_{l-1, m-1}^{l, m} &= (x)_{l, m}^{l-1, m-1} = -\frac{3}{4} n \sqrt{\frac{(n^2 - l^2)(l + m - 1)(l + m)}{(2l + 1)(2l - 1)}} a \\ &\quad \left(a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \right). \end{aligned}$$

Рассмотрим случай $n = 2$. Пусть для определенности проекция спина на ось z равна $+1/2$. Введем обозначения $\beta = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}$, $\gamma = \frac{3}{\sqrt{2}} e\mathcal{E}a$. Матрица оператора возмущения в этих обозначениях имеет следующий вид:

$$\begin{pmatrix} 2\beta & 0 & 0 & -\gamma \\ 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \\ -\gamma & 0 & \gamma & \beta \end{pmatrix}.$$

Нумерация состояний производится в порядке убывания l и m . Состояние с квантовыми числами $l = 1$, $m = 0$

не комбинирует с остальными. Энергия этого состояния равна $E_1^{(1)} = \beta$. Остальные три собственные значения матрицы возмущения находятся из решения секулярного уравнения

$$E^3 - 3\beta E^2 + 2(\beta^2 - \gamma^2)E + 2\gamma^2\beta = 0.$$

Решая его, имеем:

$$E_2^{(1)} = \beta, \quad E_{3,4}^{(1)} = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + 2\gamma^2}$$

или, подставляя значения β и γ ,

$$E_2^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \mathcal{H}, \quad E_{3,4}^{(1)} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \left\{ \mathcal{H} \pm \sqrt{\mathcal{H}^2 + \frac{36}{\alpha^2} \mathcal{G}^2} \right\}.$$

§ 8. МОЛЕКУЛА

1. Если пренебречь различием между центром тяжести молекулы и центром тяжести ядер и считать, что центр тяжести закреплен в начале координат, то уравнение Шредингера для двухатомной молекулы будет иметь следующий вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2M\rho^2} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + V(x_i, y_i, z_i; \rho, \theta, \varphi) \right\} \psi(\dots x_i, y_i, z_i, \dots \rho, \theta, \varphi) = E\psi.$$

Здесь x_i, y_i, z_i — координаты i -го электрона относительно неподвижной системы отсчета, углы θ, φ определяют положение в пространстве прямой, соединяющей ядра, ρ — расстояние между ядрами, а M — приведенная масса двух ядер. Недостаток этого уравнения заключается в том, что в потенциальную энергию V электростатического взаимодействия входят углы θ и φ . Для того чтобы придать уравнению Шредингера более удобную форму, введем новую систему координат ξ, η, ζ , вращающуюся вместе с ядрами. Ось ζ направим вдоль прямой, соединяющей ядра, а ось ξ расположим в плоскости xu . Положительное направление оси ξ выберем таким образом, чтобы оси z, ζ, ξ составляли право-

винтовую систему. Соотношения между старыми и новыми координатами имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}\xi_i &= -x_i \sin \varphi + y_i \cos \varphi, \\ \eta_i &= -x_i \cos \theta \cos \varphi - y_i \cos \theta \sin \varphi + z_i \sin \theta, \\ \zeta_i &= x_i \sin \theta \cos \varphi + y_i \sin \theta \sin \varphi + z_i \cos \theta.\end{aligned}$$

Различая дифференцирование при постоянных x_i, y_i, z_i от дифференцирования при постоянных ξ_i, η_i, ζ_i штрихом при ∂ находим:

$$\frac{\partial'}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \theta} + \sum_i \left(\zeta_i \frac{\partial}{\partial \eta_i} - \eta_i \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \right),$$

$$\frac{\partial'}{\partial \varphi} = \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sum_i \left\{ \sin \theta \left(\zeta_i \frac{\partial}{\partial \xi_i} - \xi_i \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \right) + \cos \theta \left(\xi_i \frac{\partial}{\partial \eta_i} - \eta_i \frac{\partial}{\partial \xi_i} \right) \right\}.$$

Легко видеть, что

$$\sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) = \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i^2} \right).$$

Потенциальная энергия в новой системе координат будет иметь вид

$$V = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\rho} + \sum_{i>k} \frac{e^2}{r_{ik}^*} - \sum_{k=1}^n \frac{Z_1 e^2}{r_{1k}^*} - \sum_{k=1}^n \frac{Z_2 e^2}{r_{2k}^*},$$

где

$$r_{ik}^* = \sqrt{(\xi_i - \xi_k)^2 + (\eta_i - \eta_k)^2 + (\zeta_i - \zeta_k)^2}$$

— расстояние между i -ым и k -ым электронами в новых координатах:

$$r_{1k}^* = \sqrt{\xi_k^2 + \eta_k^2 + \left(\zeta_k + \rho \frac{M_2}{M_1 + M_2} \right)^2}$$

— расстояние от k -го электрона до первого ядра и

$$r_{2k}^* = \sqrt{\xi_k^2 + \eta_k^2 + \left(\zeta_k - \frac{\rho M_1}{M_1 + M_2} \right)^2}$$

— расстояние между k -м электроном и вторым ядром. Таким образом в новых координатах потенциальная энергия не зависит от углов θ и φ .

С учетом всех приведенных соотношений уравнение Шредингера примет следующий вид:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{\hbar^2}{2M r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \operatorname{ctg} \theta \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \hat{L}_\xi \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \hat{L}_\xi \right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \sin \theta \hat{L}_\eta - i \cos \theta \hat{L}_\zeta \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + V(\xi_i, \eta_i, \zeta_i; \rho) - E \right\} \psi(\xi_i, \eta_i, \zeta_i; \rho, \theta, \varphi) = 0.$$

Здесь \hat{L}_ξ , \hat{L}_η и \hat{L}_ζ представляют измеренные в единицах \hbar операторы компонент орбитального момента электронов в системе координат ξ, η, ζ .

2. Обозначим спиновую переменную i -го электрона относительно неподвижного пространства через s'_i , а относительно подвижного через s_i . Функции $\psi(\dots s_i \dots)$ со спинами, отнесенными к координатной системе $\xi\eta\zeta$, связаны с функциями $\psi(\dots s'_i \dots)$ со спинами, отнесенными к координатной системе xuz линейным преобразованием

$$\begin{aligned} \psi(\dots s_i \dots) &= \\ &= \sum_{s'_1 \dots s'_i \dots} S(s_1, \dots, s_i, \dots, s'_1, \dots, s'_i, \dots) \psi(\dots s'_i \dots) = \\ &= \hat{S} \psi(\dots s'_i \dots), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} S(s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s'_1, \dots, s'_i, \dots) &= \\ &= S(s_1; s'_1) S(s_2; s'_2) \dots S(s_i; s'_i) \dots, \end{aligned}$$

причем

$$\begin{aligned} S\left(\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right) &= \cos \frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi + \frac{\pi}{2})}, \\ S\left(\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\right) &= i \sin \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi + \frac{\pi}{2})}, \\ S\left(-\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right) &= i \sin \frac{\theta}{2} e^{\frac{i}{2}(\varphi + \frac{\pi}{2})}, \\ S\left(-\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\right) &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-\frac{i}{2}(\varphi + \frac{\pi}{2})}. \end{aligned}$$

Искомое уравнение Шредингера будет иметь вид

$$[\hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} - E] \psi(\dots \xi_i, \eta_i, \zeta_i, s_i \dots; \rho, \theta, \varphi) = 0,$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона, найденный при решении предыдущей задачи.

Производя несложные вычисления окончательно, для уравнения Шредингера получаем следующее выражение:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{\hbar^2}{2M r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \operatorname{ctg} \theta \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \hat{M}_\xi \right) + \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \hat{M}_\xi \right)^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \sin \theta \hat{M}_\eta - i \cos \theta \hat{M}_\zeta \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + V - E \right\} \psi(\dots \xi_i, \eta_i, \zeta_i, s_i \dots; \rho, \theta, \varphi) = 0.$$

Здесь \hat{M}_ξ , \hat{M}_η , \hat{M}_ζ представляют, в отличие от предыдущей задачи, операторы компонент полного момента электронов (орбитального и спинового).

3. Предположим, что задача с неподвижными центрами решена, т. е. известны электронные термы $E^{\text{эл}}(\rho)$ и волновая функция $\Phi_{\text{эл}}$. Для определенности рассмотрим тип связи a ; пусть в состоянии, описываемом волновой функцией $\Phi_{\text{эл}}$, проекция полного момента (орбитального и спинового) на ось молекулы равна Ω . Умножим уравнение Шредингера

$$\hat{H} \Phi_{\text{эл}}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i; \sigma_i; \rho) f(\rho) \Theta(\theta, \varphi) = \\ = E \Phi_{\text{эл}}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i; \sigma_i; \rho) f(\rho) \Theta(\theta, \varphi)$$

слева на $\Phi_{\text{эл}}^*$ и проинтегрируем по координатам задачи с неподвижными центрами и просуммируем по σ_i . Замечая, что

$$\int \Phi_{\text{эл}}^* \hat{M}_\xi \Phi_{\text{эл}} d\tau = \int \Phi_{\text{эл}}^* \hat{M}_\eta \Phi_{\text{эл}} d\tau = 0,$$

имеем:

$$\left[B \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - E^{\text{эл}}(\rho) - U(\rho) - E^{\text{вп}} + E \right] f(\rho) = 0, \\ B \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \Omega \cos \theta \right)^2 \right] \Theta(\theta, \varphi) + \\ + E^{\text{вп}} \Theta(\theta, \varphi) = 0.$$

В последних двух уравнениях введены следующие сокращенные обозначения:

$$U(\rho) = \frac{1}{M} \int \Phi_{эл}^* \left\{ \frac{1}{\rho^2} (M_{\xi}^2 + M_{\eta}^2) - \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \right\} \Phi_{эл} d\tau,$$

$$B = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{\rho^2}.$$

Величина B называется ротационной постоянной.

4. Молекула N_2 (атомы в состоянии 4S): $^1\Sigma_g^+$, $^3\Sigma_u^+$, $^5\Sigma_g^+$, $^7\Sigma_u^+$.

Молекула Br_2 (атомы в состоянии 2P):

$$2^1\Sigma_g^+, \quad 1^1\Sigma_u^-, \quad 1^1\Pi_g, \quad 1^1\Pi_u, \quad 1^1\Delta_g;$$

$$2^3\Sigma_u^+, \quad 3^3\Sigma_g^-, \quad 3^3\Pi_g, \quad 3^3\Pi_u, \quad 1^1\Delta_u.$$

Молекула LiH (атом Li в состоянии 2S_g ,

атом H в состоянии 2S_g): $1^1\Sigma^+$, $3^3\Sigma^+$.

Молекула HBr (атом Br в состоянии 2P_u): $1^1\Sigma^+$, $3^3\Sigma^+$, $1^1\Pi$, $3^3\Pi$.

Молекула CN (атом C в состоянии 3P_g ,

атом N в состоянии 4S_u): $2^2\Sigma^+$, $4^4\Sigma^+$, $6^6\Sigma^+$, $2^2\Pi$, $4^4\Pi$, $6^6\Pi$.

(Число, стоящее перед символом термина, указывает количество термов.)

5. Атом гелия в основном состоянии характеризуется тем, что оба его электрона находятся на наиболее низком уровне (парагелий). Полная собственная функция основного состояния атома гелия может быть приближенно представлена в виде

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_a(1) \psi_a(2) \{ \eta_+(\sigma_1) \eta_-(\sigma_2) - \eta_+(\sigma_2) \eta_-(\sigma_1) \},$$

где ψ_a — есть водородная функция.

Атом водорода имеет собственную функцию

$$\psi_b(3) \eta_+(\sigma_3) \quad \text{или} \quad \psi_b(3) \eta_-(\sigma_3).$$

Если оба атома находятся на большом расстоянии друг от друга, то волновая функция системы напишется в виде произведения

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) \{ \eta_+(\sigma_1) \eta_-(\sigma_2) - \eta_+(\sigma_2) \eta_-(\sigma_1) \} \eta_+(\sigma_3).$$

С учетом обмена электронами собственная функция системы должна быть антисимметричной относительно перестановки всех электронов. Существует только одна антисимметричная собственная функция, которая и является собственной функцией нашей системы в нулевом приближении

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6(1-S)}} \{ \psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) [\eta_+(1) \eta_-(2) - \eta_+(2) \eta_-(1)] \eta_+(3) + \psi_a(3) \psi_a(1) \psi_b(2) [\eta_+(3) \eta_-(1) - \eta_+(1) \eta_-(3)] \eta_+(2) + \psi_a(2) \psi_a(3) \psi_b(1) [\eta_+(2) \eta_-(3) - \eta_+(3) \eta_-(2)] \eta_+(1) \}. \quad (1)$$

В выражении (1) $\frac{1}{\sqrt{6(1-S)}}$ есть нормировочный множитель, а

$$\begin{aligned} S &= \int \psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) \psi_a(2) \psi_a(3) \psi_b(1) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 = \\ &= \int \psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) \psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 = \\ &= \int \psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2) \psi_a(2) \psi_a(3) \psi_b(1) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3. \end{aligned}$$

Применяя обычную теорию возмущения, имеем:

$$\varepsilon = \sum_{\sigma} \int \Psi \hat{H} \Psi d\tau,$$

где Ψ — собственная функция в нулевом приближении, \hat{H} — энергия возмущения, суммирование производится по спиновым переменным. Нужно иметь ввиду, что \hat{H} имеет различное выражение для разных составных частей Ψ , а именно: для $\psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3)$ энергия возмущения равна

$$\hat{H} = e^2 \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{r_{a3}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \right),$$

а для $\psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2)$

$$\hat{H} = e^2 \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b3}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{32}} \right).$$

Принимая во внимание то, что интегралы, отличающиеся только нумерацией электронов, идентичны, имеем:

$$\varepsilon = \frac{K-A}{1-S}, \quad (2)$$

где

$$K = e^2 \int \left(\frac{2}{R} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{1}{r_{a3}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} \right) \times \\ \times \psi_a^2(1) \psi_a^2(2) \psi_b^2(3) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3,$$

$$A = e^2 \int \left(\frac{2}{R} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{1}{r_{a3}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{b2}} \right) \times \\ \times \psi_a(1) \psi_a(2) \psi_b(3) \psi_a(1) \psi_a(3) \psi_b(2) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3.$$

Интегралы K , A , S в общем имеют одинаковый характер с соответствующими интегралами проблемы молекулы водорода. Вычисление интегралов показывает, что формула (2) соответствует кривой отталкивания. Это справедливо не только для атома гелия, но и для всех благородных газов.

6. После отделения движения центра инерции для волновой функции относительного движения ядер получим следующее уравнение:

$$\Delta\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E + 2D \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \right) \right] \psi = 0.$$

Разделяя переменные в сферических координатах и полагая

$$\psi = \frac{\chi(\rho)}{\rho} Y_{KM}(\theta, \varphi),$$

находим для χ дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left[-\lambda^2 + \frac{2\gamma^2}{\rho} - \frac{\gamma^2 + K(K+1)}{\rho^2} \right] \chi = 0,$$

$$\lambda = \sqrt{-\frac{2\mu a^3 E}{\hbar^2}}, \quad \gamma^2 = \frac{2\mu a^3}{\hbar^2} D.$$

Замена переменных $\chi(\rho) = \rho^s e^{-\lambda\rho} u(\rho)$, где $s = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(K + \frac{1}{2}\right)^2}$, приводит к гипергеометрическому уравнению

$$\rho u'' + (2s - 2\lambda\rho) u' + (-2s\lambda + 2\gamma^2) u = 0.$$

Решение этого уравнения, конечное при $\rho = 0$, имеет следующий вид:

$$u = cF\left(s - \frac{\gamma^2}{\lambda}, 2s, 2\lambda\rho\right).$$

В состояниях дискретного спектра волновая функция χ должна стремиться к нулю при $r \rightarrow \infty$. Для этого необходимо, чтобы выражение для u сводилось к полиномам:

$$s - \frac{\gamma^2}{\lambda} = -v,$$

где v — целое неотрицательное число. Из этого условия получаем энергетические уровни

$$E_{vK} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \frac{\gamma^4}{\left[v + \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(K + \frac{1}{2}\right)^2}\right]^2}.$$

Безразмерный параметр γ^2 пропорционален приведенной массе ядер μ , так что $\gamma^2 \gg 1$. Если v и K не очень велики

$$v \ll \gamma, \quad K \ll \gamma,$$

выражение E_{vK} принимает следующий вид:

$$E_{vK} = -D + \hbar\omega_0 \left(v + \frac{1}{2}\right) + \\ + \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left(K + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^2}{2\mu a^2} \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^3 \left(K + \frac{1}{2}\right) \left(v + \frac{1}{2}\right)}{2\mu^2 a^4 \omega_0},$$

где

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{\mu a^2}}.$$

Энергия диссоциации приближенно равна

$$E_0 = D - \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

Второй и третий члены в выражении для E_{vK} дают энергию колебательного и вращательного движения. Четвертый член учитывает ангармоничность колебаний и, наконец, пятый член дает поправку к энергии за счет взаимодействия между вращением и колебанием ядер.

Поскольку D есть величина порядка единицы в атомных единицах ($e = m = \hbar = 1$), из полученного выражения следует, что

$$D : \hbar\omega_0 : \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \sim 1 : \sqrt{\frac{m}{\mu}} : \frac{m}{\mu},$$

где m — масса электрона.

Отсюда видно, что разность энергий между двумя квантовыми состояниями с различным движением электронов (величина порядка D) велика по сравнению с разностью энергий различных колебательных состояний, которая в свою очередь велика в сравнении с расстоянием между вращательными уровнями.

7. Находим минимум эффективного потенциала

$$W = -2D \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{2\rho^2} \right) + \frac{A^2}{\rho^2}, \quad \text{где} \quad A^2 = \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2\mu a^2},$$

из условия равенства нулю его производной:

$$W' = -2D \left(-\frac{1}{\rho^2} + \frac{1}{\rho^3} \right) - \frac{2A^2}{\rho^3} = 0,$$

откуда получаем:

$$\rho_0 = 1 + \frac{A^2}{D}.$$

Разложим теперь эффективный потенциал вблизи найденного положения равновесия:

$$W(\rho) \approx -2D \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_0^2} \right) + \frac{A^2}{\rho_0^2} + \frac{D + A^2}{\rho_0^4} (\rho - \rho_0)^2,$$

удерживая здесь члены порядка A^2 , получаем:

$$W(\rho) \approx -D + A^2 + (D - 3A^2)(\rho - \rho_0)^2.$$

Подставим это выражение в уравнение для χ

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} [E + D - A^2 - (D - 3A^2)(\rho - \rho_0)^2] \chi = 0.$$

Отсюда находим энергетические уровни:

$$E_{vK} = -D + A^2 + \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right).$$

Здесь в том же приближении

$$\omega = \omega_0 \left(1 - \frac{3}{2} \frac{A^2}{D} \right), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{\mu a^2}}.$$

Окончательно для энергии E_{vK} имеем:

$$E_{vK} = -D + \hbar\omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2\mu a^2} - \frac{3}{2} \frac{\hbar K(K+1) \left(v + \frac{1}{2} \right)}{\mu^2 a^4 \omega_0}.$$

Вследствие того, что при этом вычислении не учитывался эффект ангармоничности, здесь отсутствует член $-\frac{3\hbar^2}{2\mu a^2}\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2$, полученный при решении предыдущей задачи.

8. В инфракрасной полосе мы имеем дело с переходами в основном электронном состоянии, при которых изменяются колебательные и вращательные квантовые числа. Для частоты перехода между двумя состояниями $\nu', J' \rightarrow \nu'', J''$ имеем:

$$\omega = \omega_0(\nu' - \nu'') + \frac{\hbar}{2\mu a^2} [J'^2 + J' - J''^2 - J'']$$

Из правил отбора для J следует $J'' = J' \pm 1$. При этом получается совокупность частот

$$\omega = \omega_0(\nu' - \nu'') - \frac{\hbar}{2\mu a^2} 2(J' + 1) \quad \left(\begin{array}{l} J'' = J' + 1, \\ J' = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right)$$

и

$$\omega = \omega_0(\nu' - \nu'') + \frac{\hbar}{2\mu a^2} 2J' \quad \left(\begin{array}{l} J'' = J' - 1, \\ J' = 1, 2, \dots \end{array} \right)$$

Отметим, что эти два ряда частот в молекулярной спектроскопии называются соответственно P и R ветвью.

Из полученных выражений видно, что разность частот двух соседних линий при фиксированных ν' и ν'' равна в см^{-1}

$$\Delta\nu = \frac{\Delta\omega}{2\pi c} = \frac{\hbar}{2\pi c \mu a^2}$$

Момент инерции молекулы HCl^{35}

$$I = \mu a^2 = \frac{\hbar}{2\pi c \Delta\nu} = 2,65 \cdot 10^{-40} \text{ г} \cdot \text{см}^2$$

Используя значение приведенной массы

$$\mu = M_{\text{H}} \frac{1 \cdot 35}{1 + 35} = 0,972 M_{\text{H}} = 1,61 \cdot 10^{-24} \text{ г},$$

находим расстояние между ядрами в HCl :

$$a = \sqrt{\frac{I}{\mu}} = 1,29 \cdot 10^{-8} \text{ см}.$$

Равновесные расстояния a в молекулах DCl и HCl одинаковы, поскольку форма потенциальных кривых определяется

состоянием электронов. Отсюда следует, что

$$\frac{\Delta\nu_{\text{DCl}}}{\Delta\nu_{\text{HCl}}} = \frac{\mu_{\text{HCl}}}{\mu_{\text{DCl}}}; \quad \Delta\nu_{\text{DCl}} = 10,7 \text{ см}^{-1}.$$

9. Расстояние между двумя первыми вращательными уровнями

$$\Delta\nu_{\text{вр}} = \frac{\hbar}{2\pi c I} = 41,5 \text{ см}^{-1}.$$

Отсюда находим:

$$\frac{\Delta\nu_{\text{вр}}}{\Delta\nu_{\text{кол}}} = 0,0104.$$

10. Энергия диссоциации молекулы D_2 равна 4,54 эв.

11. Переходя к новой переменной $\xi = \frac{r-a}{a}$, запишем уравнение для радиальной функции $\frac{\chi}{r}$:

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2} + \frac{2\mu a^2}{\hbar^2} (E - V)\chi = 0.$$

Полагая $z = \alpha e^{-2\beta\xi}$, получим:

$$\chi'' + \frac{1}{z}\chi' + \left(-\frac{s^2}{z^2} - \frac{1}{4} + \frac{v+s+\frac{1}{2}}{z} \right)\chi = 0,$$

где

$$s = \sqrt{\frac{\mu a^2 (D - E)}{\beta^2 \hbar^2}}, \quad v + s + \frac{1}{2} = \frac{\mu a^2 D}{\alpha \beta^2 \hbar^2}, \quad \alpha^2 = \frac{2\mu a^3 D}{\beta^2 \hbar^2}.$$

Полученное уравнение заменой $\chi = e^{-\frac{z}{2}} z^s u(z)$ сводится к гипергеометрическому $zu'' + (2s+1-z)u' + nu = 0$, решением которого является вырожденная гипергеометрическая функция $u = F(-v, 2s+1, z)$. Эта функция удовлетворяет условию обращения χ в нуль при $r \rightarrow +\infty$ при положительных значениях s (дискретный спектр). При $r \rightarrow -\infty$ волновая функция должна обращаться в нуль. Для выполнения этого условия необходимо, чтобы F сводилось к полиномам, т. е. чтобы v было неотрицательным целым числом. Это условие определяет энергетический спектр

$$E_n = \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega^3}{4D} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2, \quad \text{где} \quad \omega = 4\beta \sqrt{\frac{D}{2\mu a^2}}.$$

Таким образом, расстояние между колебательными уровнями уменьшается с увеличением квантового числа v .

Энергия диссоциации равна

$$E_0 = D - \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar^2\omega^2}{16D}.$$

13. В качестве параметров, характеризующих вращение, возьмем углы Эйлера (θ , ψ , φ). В этом случае координаты точки x , y , z в неподвижной системе связаны с координатами ξ , η , ζ в подвижной системе отсчета следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} x &= \xi(\cos\psi\cos\varphi - \sin\psi\sin\varphi\cos\theta) - \\ &\quad - \eta(\cos\psi\sin\varphi + \sin\psi\cos\varphi\cos\theta) + \zeta\sin\psi\sin\theta, \\ y &= \xi(\sin\psi\cos\varphi + \cos\psi\sin\varphi\cos\theta) + \\ &\quad + \eta(-\sin\psi\sin\varphi + \cos\psi\cos\varphi\cos\theta) - \zeta\cos\psi\sin\theta, \\ z &= \xi\sin\varphi\sin\theta + \eta\cos\varphi\sin\theta + \zeta\cos\theta. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Для того чтобы найти вид операторов \hat{J}_ξ , \hat{J}_η , \hat{J}_ζ , воспользуемся тем соображением, что оператор \hat{J}_ξ есть $\hat{J}_\xi = -i\frac{\partial}{\partial\alpha}$, где α угол, отсчитываемый в плоскости, перпендикулярной оси ξ . Так как вследствие поворота системы координат ξ , η , ζ относительно, например, оси ξ на бесконечно малый угол $d\alpha$, значения углов изменятся, то мы можем написать, что \hat{J}_ξ , измеренный в единицах \hbar , равен

$$\hat{J}_\xi = -i\left(\frac{\partial\theta}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).$$

При бесконечно малом повороте относительно оси ξ на угол $d\alpha$ имеем:

$$\left. \begin{aligned} \xi &= \xi', \\ \eta &= \eta' - \zeta' d\alpha, \\ \zeta &= \eta' d\alpha + \zeta' \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

и

$$\begin{aligned} z &= \xi' \sin(\varphi + d\varphi) \sin(\theta + d\theta) + \\ &\quad + \eta' \cos(\varphi + d\varphi) \sin(\theta + d\theta) + \zeta' \cos(\theta + d\theta). \end{aligned} \quad (3)$$

С другой стороны, подставляя (2) в (1), получаем:

$$\begin{aligned} z &= \xi' \sin\varphi \sin\theta + \eta' (\cos\varphi \sin\theta + \cos\theta d\alpha) + \\ &\quad + \zeta' (\cos\theta - \cos\varphi \sin\theta d\alpha). \end{aligned} \quad (4)$$

Сравнивая (3) и (4), находим:

$$\frac{d\theta}{d\alpha} = \cos \varphi, \quad \frac{d\varphi}{d\alpha} = -\sin \varphi \operatorname{ctg} \theta.$$

Поступая аналогично, имеем: $\frac{d\psi}{d\alpha} = \frac{\sin \varphi}{\sin \theta}$.

Окончательно для \hat{J}_ξ получаем выражение

$$\hat{J}_\xi = -i \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \psi} \right).$$

Таким же образом находятся выражения двух других операторов

$$\hat{J}_\eta = -i \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \varphi \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \psi} \right),$$

$$\hat{J}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

$$16. \quad E_J = \frac{\hbar^2}{2A} J(J+1).$$

Каждый уровень вырожден $(2J+1)$ раз по направлениям момента относительно неподвижного пространства и столько же раз по направлениям момента относительно самого тела.

$$17. \quad \text{Так как } \hat{H} = \frac{1}{2A} \hat{J}^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A} \right) \hat{J}_z^2, \text{ то } E = \\ = \frac{1}{2A} J(J+1) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A} \right) k^2; \quad J_z = k \quad |k| \leq J.$$

В этом случае полная кратность вырождения уровня равна $2(2J+1)$. Вырождение по направлениям момента в неподвижном пространстве остается по-прежнему равным $(2J+1)$.

18.

$$-\frac{\hbar^2}{2A} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial \psi^2} \right) - \right. \\ \left. - 2 \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \psi \partial \varphi} \right\} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = Eu.$$

19. Поскольку с \hat{J}^2 коммутируют операторы $\hat{J}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$ и $\hat{J}_z = -i \frac{\partial}{\partial \psi}$, то собственную функцию будем искать в виде

$$\Phi_{kJM_J} = \Theta_{kJM_J}(\theta) e^{iM_J\psi} e^{ik\varphi},$$

где M_J , k — проекции момента на неподвижную ось z и подвижную ось ζ соответственно.

Так как ψ и φ входят в уравнение (14) симметрично, а $|k| \leq J$, то $|M_J| \leq J$.

Рассмотрим операторы

$$\hat{J}_\xi + i\hat{J}_\eta = -ie^{-i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \psi} \right), \quad (1)$$

$$\hat{J}_\xi - i\hat{J}_\eta = -ie^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \psi} \right). \quad (2)$$

Легко проверить, что

$$\hat{J}_\zeta (\hat{J}_\xi - i\hat{J}_\eta) \Phi_{kJM_J} = (k+1) (\hat{J}_\xi - i\hat{J}_\eta) \Phi_{kJM_J},$$

т. е. выражение $(\hat{J}_\xi - i\hat{J}_\eta) \Phi_{kJM_J}$ есть собственная функция, соответствующая значению $(k+1)$ оператора \hat{J}_ζ .

Положим $k=J$, тогда имеем:

$$(\hat{J}_\xi - i\hat{J}_\eta) \Phi_{JJM_J} \equiv 0.$$

Последнее соотношение можно представить в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \psi} \right) \Theta_{JJM_J}(\theta) e^{iM_J\psi} e^{iJ\varphi} \equiv 0.$$

Отсюда найдем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка для определения Θ_{JJM_J}

$$\frac{d\Theta_{JJM_J}}{d\theta} + \frac{M_J - J \cos \theta}{\sin \theta} \Theta_{JJM_J} = 0.$$

Общее решение этого уравнения имеет вид

$$\Theta_{JJM_J} = c \frac{(\sin \theta)^J}{\left(\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \right)^{M_J}} \quad \left. \vphantom{\Theta_{JJM_J}} \right\} \quad (3)$$

или

$$\Theta(\theta) = c (1 - \cos \theta)^{\frac{J-M_J}{2}} (1 + \cos \theta)^{\frac{J+M_J}{2}}.$$

Поскольку функция Θ должна быть конечной, то $|M_J| \leq J$.

Для того чтобы определить функцию Θ_{kJMJ} , рассмотрим действие на нее оператора $(\hat{J}_\xi + i\hat{J}_\eta)$. Так как

$$\hat{J}_\xi (\hat{J}_\xi + i\hat{J}_\eta) \Theta_{kJMJ} = (k-1)(\hat{J}_\xi + i\hat{J}_\eta) \Theta_{kJMJ},$$

то

$$(\hat{J}_\xi + i\hat{J}_\eta) \Theta_{kJMJ} = \alpha_k \Theta_{k-1MJ}. \quad (4)$$

Подставляя в (4) явный вид оператора $(\hat{J}_\xi + i\hat{J}_\eta)$ из (1), приходим к уравнению

$$\frac{d\Theta_{kJMJ}}{d\theta} + \frac{k \cos \theta - M_J}{\sin \theta} \Theta_{kJMJ} = i\alpha_k \Theta_{k-1MJ},$$

которое после введения переменной $x = \cos \theta$ принимает вид

$$\sqrt{1-x^2} \frac{dP_{kJMJ}(x)}{dx} + \frac{M_J - kx}{\sqrt{1-x^2}} P_{kJMJ}(x) = -i\alpha_k P_{k-1MJ}(x),$$

где

$$P_{kJMJ}(x) = \Theta_{kJMJ}(\arccos x).$$

Положив

$$P_{kJMJ} = (1-x)^{-\frac{(k-M_J)}{2}} (1+x)^{-\frac{(k+M_J)}{2}} v_{kJMJ}, \quad (5)$$

найдем простое соотношение для определения v_{kJMJ}

$$\frac{dv_{kJMJ}}{dx} = -i\alpha_k v_{k-1MJ}. \quad (6)$$

Ранее найденные функции P_{JJMJ} (см. (3)), можно переписать в виде (5)

$$P_{JJMJ}(x) = (1-x)^{-\frac{(J-M_J)}{2}} (1+x)^{-\frac{(J+M_J)}{2}} v_{JJMJ},$$

где через v_{JJMJ} мы обозначим выражение

$$v_{JJMJ}(x) = c (1-x)^{J-M_J} (1+x)^{J+M_J}. \quad (7)$$

Из (7) и рекуррентного соотношения (6) вытекает, что

$$v_{kJMJ} = c \frac{d^{J-k}}{(dx)^{J-k}} \{(1-x)^{J-M_J} (1+x)^{J+M_J}\}.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \Phi_{kJM_J}(\theta, \psi, \varphi) = & \\ = ce^{ik\varphi} e^{iM_J\psi} (1 - \cos \theta)^{\frac{k-M_J}{2}} (1 + \cos \theta)^{\frac{k+M_J}{2}} \times & \\ \times \left(\frac{d}{d \cos \theta}\right)^{J-k} \{ (1 - \cos \theta)^{J-M_J} (1 + \cos \theta)^{J+M_J} \}; & \end{aligned}$$

при $M_J = 0$ эти обобщенные сферические функции переходят, как и следовало ожидать, в обычные сферические функции и представляют собой волновые функции ротатора:

$$\Phi_{kJ0}(\theta, \varphi) = ce^{ik\varphi} \frac{1}{\sin^k \theta} \frac{d^{J-k}}{(d \cos \theta)^{J-k}} (\sin^{2J} \theta).$$

20.

$$\hat{H}_{kk} = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{B} \right) \{ J(J+1) - k^2 \} + \frac{\hbar^2 k^2}{2C},$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{kk+2} = \hat{H}_{k+2k} = & \\ = \frac{\hbar^2}{8} \left(\frac{1}{A} - \frac{1}{B} \right) \sqrt{(J-k)(J-k-1)(J+k+1)(J+k+2)}. & \end{aligned}$$

21. Для асимметрического волчка вырождение по направлениям момента относительно неподвижного пространства все еще остается. Вырождение относительно квантового числа k полностью снимается, так что данному J соответствует $(2J+1)$ различных уровней. В случае $J=1$ уровни энергии определяются из решения секулярного уравнения вида

$$\begin{aligned} & \begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{10} & H_{1,-1} \\ H_{10} & H_{00} - E & H_{0,-1} \\ H_{-11} & H_{-10} & H_{-1,-1} - E \end{vmatrix} = \\ & = \begin{vmatrix} H_{11} - E & 0 & H_{1,-1} \\ 0 & H_{00} - E & 0 \\ H_{-1,1} & 0 & H_{-1,-1} - E \end{vmatrix} = 0. \end{aligned}$$

Так как $H_{-1,-1} = H_{11}$, то имеем:

$$(H_{00} - E)(H_{11}^2 + E^2 - 2H_{11}E - H_{1,-1}^2) = 0,$$

откуда

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{A} + \frac{1}{B} \right), \quad E_2 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{C} + \frac{1}{A} \right), \quad E_3 = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{B} + \frac{1}{C} \right).$$

22.

| E | | m | |
|-------|---------------------------------------|-----|---|
| E_1 | $\Phi_{k=0, m}$ | 1 | $\frac{\sqrt{3}}{4\pi} e^{i\psi} \sin \theta$ |
| | | 0 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{8}} \cos \theta$ |
| | | -1 | $\frac{\sqrt{3}}{4\pi} e^{-i\psi} \sin \theta$ |
| E_2 | $c(\Phi_{k=1, m^+} + \Phi_{k=-1, m})$ | 1 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{16}} e^{i\psi} (\cos \varphi + i \cos \theta \sin \varphi)$ |
| | | 0 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{8}} \cos \varphi \sin \theta$ |
| | | -1 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{16}} e^{-i\psi} (\cos \varphi - i \cos \theta \sin \varphi)$ |
| E_3 | $c(\Phi_{k=1, m^-} - \Phi_{k=-1, m})$ | 1 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{16}} e^{i\psi} (\cos \theta \cos \varphi + i \sin \varphi)$ |
| | | 0 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{8}} \sin \theta \sin \varphi$ |
| | | -1 | $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{3}{16}} e^{-i\psi} (-\cos \theta \cos \varphi + i \sin \varphi)$ |

24. Расщепление термина обусловлено взаимодействием спин — спин. Для определения искомого расщепления необходимо оператор взаимодействия спин — спин $\alpha(\hat{S}_n)^2$ усреднить по вращательному состоянию. При данном K квантовое число J принимает значения

$$J = K + 1, K, K - 1.$$

Отличные от нуля матричные элементы $(n\hat{S})$ имеют вид

$$(n\hat{S})_{K \quad J=K}^{K-1 \quad J=K} = (n\hat{S})_{K-1 \quad J=K}^K = \sqrt{\frac{K+1}{2K+1}},$$

$$(n\hat{S})_{K \quad J=K}^{K+1 \quad J=K} = (n\hat{S})_{K+1 \quad J=K}^K = \sqrt{\frac{K}{2K+1}},$$

$$(n\hat{S})_{K+1 \quad J=K+1}^K = (n\hat{S})_{K \quad J=K+1}^{K+1} = \sqrt{\frac{K+2}{2K+3}},$$

$$(n\hat{S})_{K-1 \quad J=K-1}^K = (n\hat{S})_{K \quad J=K-1}^{K-1} = \sqrt{\frac{K-1}{2K-1}}.$$

Пользуясь последними соотношениями, находим искомое расщепление компонент триплета:

$$\Delta E_{J=K+1} = \frac{K+2}{2K+3} \alpha, \quad \Delta E_{J=K} = \alpha, \quad \Delta E_{J=K-1} = \frac{K-1}{2K-1} \alpha$$

25. Найдем прежде всего недиагональные элементы оператора ω

$$\{\omega\}_{n\Delta\Omega'vJ'}^{n\Delta\Omega vJ}$$

Легко видеть, что отличны от нуля только матричные элементы, соответствующие $\Omega' = \Omega \pm 1$, $J = J'$.

Так как

$$\{\hat{M}_z\}_{n\Delta\Omega \pm 1}^{n\Delta\Omega} = \mp i \{\hat{M}_\tau\}_{n\Delta\Omega \pm 1}^{n\Delta\Omega},$$

то

$$\begin{aligned} \{\omega\}_{n\Delta\Omega \pm 1vJ}^{n\Delta\Omega vJ} &= \frac{\hbar^2}{M} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\Omega \pm 1) \operatorname{ctg} \theta \right\}_{\Delta\Omega \pm 1J}^{\Delta\Omega J} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{\rho^2} \hat{M}_\tau \right\}_{n\Delta\Omega \pm 1v}^{n\Delta\Omega v}. \end{aligned}$$

Для вычисления матричного элемента

$$\left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\Omega \pm 1) \operatorname{ctg} \theta \right\}_{\Delta\Omega \pm 1J}^{\Delta\Omega J},$$

заметим, что если в операторе $(J_z + iJ_\tau)$ (см. задачу 13 § 8) положить угол $\varphi = 0$, а $-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \hat{M}_z$, то

$$\begin{aligned} (J_z \pm iJ_\tau)_{\varphi \rightarrow 0} &= \mp i \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\Omega \pm 1) \operatorname{ctg} \theta \right\}. \\ &\quad -i \frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \hat{M}_z \end{aligned}$$

Учитывая последнее соотношение, имеем:

$$\left\{ \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{l}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + (\Omega \pm 1) \operatorname{ctg} \theta \right\}_{\Delta \Omega \pm 1 J}^{\Delta \Omega J} = \\ = \pm i \sqrt{(J \mp \Omega)(J \pm \Omega + 1)}.$$

В случае малых колебаний около положения равновесия матричный элемент

$$\left\{ \frac{1}{\rho^2} \hat{M}_\eta \right\}_{n \Delta \Omega \pm 1 v}^{n \Delta \Omega v}$$

приближенно можно положить равным

$$\frac{1}{\rho_0^2} \{\hat{M}_\eta\}_{n \Delta \Omega \pm 1}^{n \Delta \Omega}$$

где ρ_0 — расстояния между ядрами в положении равновесия. Так как

$$\{\hat{L}_\eta + \hat{S}_\eta\}_{n \Delta \Omega \pm 1}^{n \Delta \Omega} = \{\hat{S}_\eta\}_{n \Delta \Omega \pm 1}^{n \Delta \Omega} = \pm \frac{l}{2} \sqrt{S(S+1) - \Sigma(\Sigma \pm 1)},$$

то окончательно имеем:

$$\{\omega\}_{n \Delta \Omega \pm 1 v J}^{n \Delta \Omega v J} = \\ = B_0 \sqrt{S(S+1) - \Sigma(\Sigma \pm 1)} \sqrt{J(J+1) - (\Delta + \Sigma)(\Delta + \Sigma \pm 1)}.$$

Здесь $B_0 = \frac{\hbar^2}{2M\rho_0^2}$ представляет собой значение ротационной постоянной для состояния равновесия, отвечающего некоторому $\rho = \rho_0$.

В общем случае дублетное расщепление может быть равно по порядку вычисленным матричным элементам. Поэтому для расчета смещения уровней дублетного термина применим теорию возмущения в несколько измененном виде. В качестве исходного нулевого приближения возьмем вместо функций

$$\psi_{n \Delta \Delta + 1/2 v J}, \quad \psi_{n \Delta \Delta - 1/2 v J}$$

их линейную комбинацию

$$\psi = c_1 \psi_{n \Delta \Delta + 1/2 v J} + c_2 \psi_{n \Delta \Delta - 1/2 v J}.$$

Подставляя это выражение в возмущенное уравнение и поступая стандартным образом, находим секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} E_{n\Delta\Delta+1/2vJ}^{(0)} - E & \omega_{n\Delta\Delta-1/2vJ}^{n\Delta\Delta+1/2vJ} \\ \omega_{n\Delta\Delta+1/2vJ}^{n\Delta\Delta-1/2vJ} & E_{n\Delta\Delta-1/2vJ}^{(0)} - E \end{vmatrix} = 0.$$

Из решения секулярного уравнения следует, что

$$E = \frac{1}{2} E^{(0)} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta E^{(0)} + 4B_0^2 \left\{ \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 \right\}}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} E^{(0)} &= E_{n\Delta\Delta+1/2vJ}^{(0)} + E_{n\Delta\Delta-1/2vJ}^{(0)}, \\ \Delta E^{(0)} &= E_{n\Delta\Delta+1/2vJ}^{(0)} - E_{n\Delta\Delta-1/2vJ}^{(0)}. \end{aligned}$$

В случае связи *a*, когда мультиплетное расщепление велико по сравнению с вращением, из соотношения (1) приближенно следует, что

$$\begin{aligned} E_1 &= E_{n\Delta\Delta+1/2vJ}^{(0)} + \frac{B_0^2 \left\{ \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 \right\}}{\Delta E^{(0)}}, \\ E_2 &= E_{n\Delta\Delta-1/2vJ}^{(0)} - \frac{B_0^2 \left\{ \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 \right\}}{\Delta E^{(0)}}. \end{aligned}$$

В случае связи *b* из (1) получаем:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} E^{(0)} \pm B_0 \left\{ \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 \right\} \pm \frac{\Delta E^{(0)}}{8B_0 \left\{ \left(J + \frac{1}{2} \right)^2 - \Lambda^2 \right\}}.$$

26. $K = 0, 2, 4, \dots$, если суммарный спин $S = 2$ или $S = 0$,
 $K = 1, 3, 5, \dots$, если суммарный спин $S = 1$.

27. Магнитный момент молекулы равен $\frac{e\hbar}{2mc} (\Lambda + 2\Sigma) n$,

где n — единичный вектор, направленный по оси молекулы.

Для определения энергии расщепления необходимо усреднить величину

$$-\frac{e\hbar}{2mc} (\Lambda + 2\Sigma) n \mathfrak{J} \ell$$

по вращательному состоянию, т. е. определить матричные элементы

$$(n)_{JM_j}^{JM_j}$$

Так как \hat{J} есть единственный сохраняющийся вектор, то очевидно, что матричные элементы вектора \mathbf{n} будут пропорциональны матричным элементам вектора \hat{J} , т. е.

$$(\mathbf{n})_{JM_j}^{JM_j'} \sim (\hat{J})_{JM_j}^{JM_j'}.$$

Рассматривая \mathbf{n} как оператор, имеем:

$$\hat{\mathbf{n}} = \text{const } \hat{J}.$$

Для определения константы умножим последнее выражение слева и справа на \hat{J} . Так как собственные значения \hat{J}^2 равны $J(J+1)$, а $\hat{J}\hat{\mathbf{n}}$ равны Ω , то имеем:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\Omega}{J(J+1)} \hat{J}.$$

Таким образом, оператор энергии возмущения равен

$$-\frac{e\hbar}{2mc} (\Lambda + 2\Sigma) \cdot \frac{\Omega}{J(J+1)} \mathfrak{H} \hat{J}.$$

Вычисляя диагональные матричные элементы, получаем для энергии расщепления выражение следующего вида:

$$\Delta E_{M_j} = -\frac{e\hbar \mathfrak{H}}{2mc} (\Lambda + 2\Sigma) \frac{\Omega}{J(J+1)} M_j.$$

28. Оператор возмущения, как легко установить, в данном случае имеет следующий вид:

$$-\frac{e\hbar}{2mc} \mathfrak{H} \left\{ \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \hat{K} + 2\hat{S} \right\}.$$

Отсюда следует, что зеемановское расщепление равно

$$\Delta E_{M_j} = -M_j \frac{e\hbar \mathfrak{H}}{2mc} \times \\ \times \left\{ \Lambda^2 \frac{J(J+1) - S(S+1) + K(K+1)}{2K(K+1)J(J+1)} + \frac{J(J+1) + S(S+1) - K(K+1)}{J(J+1)} \right\}.$$

29. Энергия зеемановского расщепления равна

$$\Delta E_{M_K M_S} = -\frac{e\hbar}{2mc} \mathfrak{H} \left[\frac{\Lambda^2}{K(K+1)} M_K + 2M_S \right].$$

30. Так как энергия взаимодействия магнитного момента с внешним магнитным полем одного порядка с энергией

взаимодействия спин — ось, то их надо рассматривать в теории возмущения одновременно. Оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V} = An\hat{S} - \mu_0\Delta n\mathcal{H} - 2\mu_0\hat{S}\mathcal{H}.$$

В качестве волновых функций нулевого приближения возьмем волновые функции состояний, в которых имеют определенные значения момент K и проекция K и S на направление магнитного поля. Ось z направим по магнитному полю. Так как проекция полного момента на направление магнитного поля сохраняется, то в случае дублетного термина мы должны применить теорию возмущения при наличии двухкратного вырождения. Вычисляя матричные элементы оператора возмущения, имеем:

$$V_{M_K, -1/2}^{M_K, -1/2} = -M_K \frac{\Lambda}{2K(K+1)} A - M_K \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \mu_0\mathcal{H} + \mu_0\mathcal{H},$$

$$V_{M_K-1, 1/2}^{M_K-1, 1/2} = (M_K - 1) \frac{\Lambda}{2K(K+1)} A - \\ - (M_K - 1) \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \mu_0\mathcal{H} - \mu_0\mathcal{H},$$

$$V_{M_K-1, 1/2}^{M_K, -1/2} = \frac{1}{2} A \frac{\Lambda}{K(K+1)} \sqrt{(K - M + 1)(K + M)} = \\ = \frac{1}{2} A \{n_x + in_y\}_{M_K-1}^{M_K},$$

$$V_{M_K, -1/2}^{M_K-1, 1/2} = \frac{1}{2} A \{n_x - in_y\}_{M_K}^{M_K-1} = \\ = \frac{1}{2} A \frac{\Lambda}{K(K+1)} \sqrt{(K - M + 1)(K + M)}.$$

Составляя и решая секулярное уравнение, получим:

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \left(M_K - \frac{1}{2} \right) \mu_0\mathcal{H} - \frac{A\Lambda}{4K(K+1)} \mp \frac{1}{2K(K+1)} \times \\ \times \sqrt{\left\{ A\Lambda \left(M - \frac{1}{2} \right) - \Lambda^2 \mu_0\mathcal{H} + 2\mu_0\mathcal{H}(K+1)K \right\}^2 + A^2\Lambda^2(K+M_K)(K-M_K+1)}.$$

Рассмотрим предельные случаи.

Если $\mu_0\mathcal{H} \gg A$, то для $E_{1,2}^{(1)}$ получаем выражение

$$E_{1,2}^{(1)} = -\frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \left\{ M_K - \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right\} \mu_0\mathcal{H} \mp \mu_0\mathcal{H},$$

согласующееся с формулой, полученной в задаче 29 § 8.

При $A \gg \mu_0 \mathcal{H}$ получается

$$E_1^{(1)} = \frac{A\Lambda}{2(K+1)} - \left(M_K - \frac{1}{2}\right) \left\{ \frac{\Lambda^2}{(K+1)\left(K + \frac{1}{2}\right)} + \frac{1}{K + \frac{1}{2}} \right\} \mu_0 \mathcal{H},$$

$$E_2^{(1)} = -\frac{A\Lambda}{2K} - \left(M_K - \frac{1}{2}\right) \left\{ \frac{\Lambda^2}{K\left(K + \frac{1}{2}\right)} - \frac{1}{K + \frac{1}{2}} \right\} \mu_0 \mathcal{H}.$$

Вторые члены последних формул, т. е. члены, зависящие линейно от \mathcal{H} , совпадают с соответствующими выражениями, которые получаются при подстановке в формулу, найденную в задаче 28 § 8,

$$J = K \pm 1/2, \quad S = 1/2 \quad \text{и} \quad M_j = M_K - 1/2.$$

31. В силу аксиальной симметрии дипольный момент молекулы направлен по прямой, соединяющей ядра, т. е.

$$\mathbf{p} = p\mathbf{n}.$$

Поступая так же, как и при решении задачи 27 § 8, находим:

$$\Delta E_{M_j} = -\mathcal{E}p \frac{\Omega}{J(J+1)} M_j.$$

32.

$$\Delta E_{M_j} = -\mathcal{E}p M_j \Delta \frac{J(J+1) - S(S+1) + K(K+1)}{2K(K+1) \cdot J(J+1)}.$$

33. Поправка первого приближения к энергии равна нулю. Как известно, поправка второго приближения к энергии в случае вырождения находится из условия совместности однородных линейных уравнений

$$E_n^{(2)} c_{n\beta}^{(0)} = \sum_j c_{nj}^{(0)} \sum_{m\alpha} \frac{V_{m\alpha}^{n\beta} V_{nj}^{m\alpha}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}.$$

В нашем случае из последнего соотношения получаем:

$$E_{lm}^{(2)} = \frac{p^2 \mathcal{E}^2 A}{\hbar^2} \left\{ \frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)l} - \frac{(l+1) - m^2}{(2l+3)(2l+1)(l+1)} \right\}.$$

Таким образом энергия твердого диполя равна

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2}{2A} l(l+1) + E_{lm}^{(2)}; \quad E_{00} = -\frac{1}{3} \frac{Ap^2 \mathcal{E}^2}{\hbar^2} \quad (l=0).$$

Этот результат до некоторой степени парадоксален. В самом деле, согласно последнему равенству энергия твердого диполя пропорциональна не \mathcal{E} , а \mathcal{E}^2 . Следовательно, твердому диполю формально можно приписать определенную «поляризуемость».

Рассмотрим случай, когда $l = 1$. Уровень, соответствующий значению $m = 0$, обладает в электрическом поле большей энергией, чем вне его, так что соответствующая молекула ведет себя так, как будто она обладает отрицательной поляризуемостью. Она ведет себя подобно диамагнитному телу в магнитном поле. Молекула в состоянии $m = \pm 1$ ведет себя «нормально». Вырождение в электрическом поле снимается только частично, поскольку энергия зависит только от абсолютного значения проекции момента количества движения.

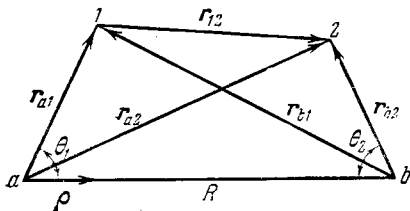


Рис. 31.

Отметим, что
$$\sum_{m=-l}^{m=+l} E_{lm}^{(2)} = 0.$$

34. При больших значениях R можно пренебречь обменом, т. е. считать, что первый электрон находится при ядре a , а второй электрон — при ядре b (см. рис. 31).

Взаимодействие двух атомов, имеющее вид

$$V = \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{12}} \quad (1)$$

будем рассматривать как малое возмущение.

В первом приближении энергия взаимодействия двух атомов равна диагональному матричному элементу V , т. е.

$$\int \psi_0(r_{1a}) \psi_0(r_{2b}) V \psi_0(r_{1a}) \psi_0(r_{2b}) d\tau_1 d\tau_2,$$

где

$$\psi_0(r_{1a}) = 2e^{-r_{1a}}; \quad \psi_0(r_{2b}) = 2e^{-r_{2b}}.$$

В S -состоянии диагональные матричные элементы, т. е. среднее значение дипольного, квадрупольного и т. д. моментов, равны нулю, поэтому для вычисления энергии

взаимодействия необходимо перейти ко второму приближению теории возмущений.

В операторе возмущения (1) ограничимся диполь — дипольным взаимодействием, как наиболее медленно убывающим с расстоянием. Для получения оператора диполь — дипольного взаимодействия разложим потенциал V по убывающим степеням R . Разложение по шаровым функциям дает

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{b1}} &= \frac{1}{|R\rho - r_{a1}|} = \sum_{\lambda=0} \frac{r_{a1}^{\lambda}}{R^{\lambda+1}} P_{\lambda}(\cos\theta) = \\ &= \frac{1}{R} + \frac{r_{a1}\rho}{R^2} + \frac{3(r_{a1}\rho)^2 - r_{a1}^2}{2R^3} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_{12}} &= \frac{1}{|R\rho + r_{b2} - r_{a1}|} = \\ &= \frac{1}{R} + \frac{(r_{a1} - r_{b2}, \rho)}{R^2} + \frac{3(r_{a1} - r_{b2}, \rho)^2 - (r_{a1} - r_{b2})^2}{2R^3} + \dots \end{aligned}$$

$$\frac{1}{r_{a2}} = \frac{1}{R} + \frac{(r_{b2}\rho)}{R^2} + \frac{3(r_{b2}\rho)^2 - r_{b2}^2}{2R^3} + \dots$$

Подставляя полученные разложения в V , находим выражение для диполь — дипольного взаимодействия

$$V = - \frac{2z_1 z_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2}{R^3}, \quad (2)$$

причем ось z направлена вдоль линии, соединяющей ядра. Как было уже сказано, среднее значение (2) по невозмущенной собственной функции $\psi = \psi_0(r_{a1})\psi_0(r_{b2})$ равно нулю. Недиagonальные элементы (2), соответствующие переходам из основного состояния в возбужденные состояния, можно представить в виде

$$V_{00}^{mn} = - \frac{2z_{0m} z_{0n} - x_{0m} x_{0n} - y_{0m} y_{0n}}{R^3}.$$

На основании правила отбора матричные элементы z_{0n} , x_{0n} , y_{0n} отличны от нуля только для переходов из основного состояния в состояния

$$\psi_n(r) \cos \theta, \quad \psi_n(r) \sin \theta \cos \varphi,$$

причем все эти три матричные элемента равны друг другу. Энергия взаимодействия во втором приближении равна

$$E^{(2)} = \sum_{mn} \frac{(V_{00}^{mn})^2}{2E_0 - E_m - E_n} = \frac{1}{R^6} \sum_{mn} \frac{4z_{0m}^2 z_{0n}^2 + x_{0m}^2 x_{0n}^2 + y_{0m}^2 y_{0n}^2}{2E_0 - E_m - E_n}$$

или

$$E^{(2)} = \frac{6}{R^6} \sum_{mn} \frac{z_{0m}^2 z_{0n}^2}{2E_0 - E_m - E_n}. \quad (3)$$

Так как $E_0 < E_m$ и $E_0 < E_n$, то $E^{(2)}$ отрицательно и, следовательно, два атома в невозбужденном состоянии, находящиеся на большом расстоянии друг от друга, притягиваются с силой, обратно пропорциональной седьмой степени расстояния. Для приближенного расчета суммы в (3) заметим, что разность энергий между различными верхними уровнями мала по сравнению с разностями энергий между верхними уровнями и основным. Поэтому приближенно (3) можно представить в виде

$$E^{(2)} = \frac{3}{R^6} \sum_m z_{0m}^2 \sum_n \frac{z_{0n}^2}{E_0 - E_n}.$$

Из теории квадратичного эффекта Штарка следует, что

$\sum \frac{z_{0n}^2}{E_0 - E_n} = -\frac{1}{2} \alpha$, где α — поляризуемость атома. Для основного состояния атома водорода $\alpha = 4,5$ ат. ед. При вычислении суммы $\sum_{m \neq 0} z_{0m}^2$ воспользуемся правилом умножения матриц

$$(AB)_{nk} = \sum_m A_{nm} B_{mk}$$

или

$$\int \psi_n^* (AB) \psi_k d\tau = \sum_m \left\{ \int \psi_n^* A \psi_m d\tau \cdot \int \psi_m^* B \psi_k d\tau \right\}.$$

Положив в последнем соотношении $A = B = z$, $n = k = 0$, получим:

$$(z^2)_{00} = \sum_m z_{0m} z_{m0} = \sum z_{0m}^2$$

или

$$\sum_{m \neq 0} z_{0m}^2 = \sum_m z_{0m}^2 - z_{00}^2 = (z^2)_{00} - z_{00}^2.$$

Так как в S -состоянии в силу симметрии $z_{00} = 0$, а $(z^2)_{00} = \frac{1}{3} (r^2)_{00}$, то сумма

$$\sum_{m \neq 0} z_{0m}^2 = \frac{1}{3} (r^2)_{00} = 1.$$

Таким образом, для $V(r)$ получаем окончательно выражение

$$V(R) = -\frac{6,75}{R^6}.$$

Для того чтобы уяснить, как могут возникнуть силы взаимодействия между двумя нейтральными сферически-симметричными атомами водорода, рассмотрим волновую функцию системы. Для волновой функции системы в первом приближении получаем выражение

$$\psi = \psi_0(r_{a1}) \psi_0(r_{b2}) \left[1 + \frac{1}{2E_0 R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) \right].$$

Плотность вероятности $\omega(1, 2)$, если пренебречь членами, содержащими $\frac{1}{R^6}$ в качестве множителя, имеет вид

$$\omega(r_{a1}, r_{b2}) = \omega_0(r_{a1}) \omega_0(r_{b2}) \left[1 + \frac{1}{E_0 R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) \right].$$

Если нет взаимодействия между атомами, плотность вероятности равна просто произведению $\omega(1)$ на $\omega(2)$, т. е. между положениями электронов в этом случае нет никакой корреляции. В случае же взаимодействия положение первого электрона не независимо от положения второго. Электроны занимают статистически чаще те положения, в которых их взаимная потенциальная энергия имеет по возможности меньшее значение.

Таким образом, силы взаимодействия в первом приближении можно объяснить не деформацией электронных оболочек, а корреляцией между положением электронов.

35. Докажем аддитивность для системы, состоящей из трех атомов. Из расчета будет видно, что его можно применить к любому числу атомов. Энергию взаимодействия запишем в следующей форме:

$$V = V(1, 2) + V(2, 3) + V(3, 1),$$

где через 1, 2, 3 обозначены совокупности координат первого, второго и третьего атомов. Мы рассматриваем взаимо-

действие атомов, находящихся на большом расстоянии друг от друга; в этом случае обменные силы не играют никакой роли. Волновую функцию трех атомов при игнорировании обмена в нулевом приближении зададим в форме

$$\psi = \psi_{ai}(1)\psi_{bk}(2)\psi_{cl}(3),$$

где i, k, l — указывают квантовые состояния атомов a, b, c . Функции $\psi_{ai}(1)$, принадлежащие различным значениям i , ортогональны. То же самое можно сказать и про функции $\psi_{bk}(2)$ и $\psi_{cl}(3)$.

Энергия возмущения во втором приближении имеет вид

$$\varepsilon = V_{000}^{000} + \sum' \frac{|V_{ikl}^{000}|^2}{E_{a0} + E_{b0} + E_{c0} - E_{ai} - E_{bk} - E_{cl}}. \quad (1)$$

Штрих у знака суммы означает, что i, k, l не должны одновременно равняться нулю. Первый член представляет классическое взаимодействие мультиполей. В нашем случае он равен нулю. В выражении (1) все члены, у которых одновременно $i \neq 0, k \neq 0, l \neq 0$, исчезают вследствие ортогональности функций.

Три частные суммы с $i = k = 0, l \neq 0$; $i = l = 0, k \neq 0$; $k = l = 0, i \neq 0$ означают поляризационные взаимодействия соответственно l -го, k -го и i -го атомов в результирующем поле двух остальных атомов. В случае, когда распределение зарядов в атомах обладает шаровой симметрией, эти суммы также исчезают. Необходимо заметить, что эти суммы не могут быть получены путем аддитивного учета энергии взаимодействия каждой пары атомов. Нам остается рассмотреть те члены, в которых два индекса отличны от нуля. Итак, при сделанных предположениях относительно распределения заряда в атомах энергия взаимодействия может быть разложена на три частных суммы:

$$\begin{aligned} \varepsilon = & \sum'_{i \neq 0, k \neq 0} \frac{|V_{ik0}^{000}|^2}{E_{a0} + E_{b0} - E_{ai} - E_{bk}} + \sum'_{k \neq 0, l \neq 0} \frac{|V_{0kl}^{000}|^2}{E_{b0} + E_{c0} - E_{bk} - E_{cl}} + \\ & + \sum_{i \neq 0, l \neq 0} \frac{(V_{i0l}^{000})^2}{E_{a0} + E_{c0} - E_{ai} - E_{cl}}. \quad (2) \end{aligned}$$

Вследствие ортогональности и нормированности собственных функций атома матричный элемент

$$\begin{aligned} V_{ik0}^{000} &= \int \psi_{a0}^*(1) \psi_{b0}^*(2) \psi_{c0}^*(3) \cdot \{V(1, 2) + \\ &\quad + V(2, 3) + V(3, 1)\} \psi_{ai}(1) \psi_{bk}(2) \psi_{c0}(3) d\tau_1 d\tau_2 = \\ &= \int \psi_{a0}^*(1) \psi_{b0}^*(2) V(1, 2) \psi_{ai}(1) \psi_{bk}(2) d\tau_1 d\tau_2 = \{V(1, 2)\}_{ik}^{00}. \end{aligned}$$

Следовательно, выражение (2) состоит из трех слагаемых, каждое из которых представляет дисперсионное взаимодействие пар атомов. Легко видеть, что этот расчет может быть распространен на произвольное число атомов.

В том случае, когда расстояния между атомами невелики, надо принять во внимание переходы электронов от одного атома к другому, т. е. принять во внимание обменные силы.

§ 9. РАССЕЯНИЕ

1. Потенциальная энергия частицы

$$U(r) = -U_0 \quad (r < a),$$

$$U(r) = 0 \quad (r > a).$$

Необходимо найти фазы рассеяния, т. е. асимптотический вид радиальных функций, удовлетворяющих уравнениям при

$$r > a \quad \chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2},$$

при

$$r < a \quad \chi_l'' + \left[k'^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0, \quad k'^2 = \frac{2\mu(E + U_0)}{\hbar^2}$$

с граничным условием $\chi_l(0) = 0$.

В случае, когда длина волны де Бройля значительно больше размеров ямы, основной вклад в рассеяние вносит S-волна. Решение χ_0 , удовлетворяющее граничному условию, имеет вид

$$\chi_0 = A \sin k' r \quad (r < a),$$

$$\chi_0 = \sin(kr + \delta_0) \quad (r > a).$$

Фаза δ_0 , также как и коэффициент A , определяется из условия непрерывности волновой функции и ее производной при $r = a$. Эти условия дают:

$$\delta_0 = \operatorname{arctg} \left(\frac{k}{k'} \operatorname{tg} k'a \right) - ka.$$

Итак, парциальное сечение для $l = 0$

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \left[\operatorname{arctg} \left(\frac{k}{k'} \operatorname{tg} k'a \right) - ka \right]. \quad (1)$$

При малых скоростях падающих частиц ($k \rightarrow 0$) фаза рассеяния δ_0 пропорциональна k :

$$\delta_0 \approx k \left(\frac{\operatorname{tg} k_0 a}{k_0 a} - 1 \right), \quad k_0^2 = \frac{2\mu U_0}{\hbar^2}, \quad (2)$$

но благодаря множителю $\frac{1}{k^2}$ сечение σ_0 оказывается конечным

$$\sigma \approx 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{tg} k_0 a}{k_0 a} - 1 \right)^2 \quad (\text{малые } k). \quad (3)$$

Рассмотрим сечение σ_0 как функцию глубины ямы, которая характеризуется k_0 . Если яма неглубока ($k_0 a \ll 1$), то

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \frac{k_0^4 a^4}{9} = \frac{16\pi}{9} \frac{a^6 U_0^2 \mu^2}{\hbar^4}.$$

Отметим, что согласно теории возмущений

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2\mu}{\hbar^2} \int U(r) d\tau = \frac{2\mu}{\hbar^2} U_0 \frac{a^3}{3}$$

и, следовательно,

$$\sigma = 4\pi |f(\vartheta)|^2 = \frac{16\pi}{9} \frac{a^6 U_0^2 \mu^2}{\hbar^4}.$$

По мере возрастания U_0 сечение возрастает и при $k_0 a = \frac{\pi}{2}$ становится неограниченно большим. Условие $k_0 a = \frac{\pi}{2}$ совпадает с условием появления в яме первого уровня. По мере углубления ямы сечение затем начинает уменьшаться и обращается в нуль при $\operatorname{tg} k_0 a = k_0 a$. При дальнейшем увеличении U_0 сечение продолжает колебаться между 0 и ∞ , причем обращение сечения в ∞ наступает при появлении нового уровня в яме. Резкие колебания сечения при рассеянии

медленных частиц качественно объясняет тот факт, что при рассеянии медленных электронов атомом сечение может значительно отличаться от геометрического.

Отметим, что если значение $k_0 a$ близко к целому кратному $\frac{\pi}{2}$, то формулы (2) и (3) необходимо видоизменить. Действительно, в этом случае $\operatorname{tg} k'a$ оказывается большим числом и в формуле (1) нельзя произвести разложения, приводящего к формуле (7). В этом случае по-прежнему однако можно пренебречь слагаемым $ka \ll 1$ в квадратных скобках формулы (1). Тогда

$$\delta_0 = \arctg \left[\frac{k}{k'} \operatorname{tg} k'a \right]$$

и отсюда для сечения σ_0 получаем:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi(1 + O(xa))}{x^2 + k^2},$$

где по условию

$$x = \frac{k'}{\operatorname{tg} k'a} \ll \frac{1}{a}.$$

Эта формула для «резонансного» рассеяния дает зависимость сечения от k при малых k , если потенциальная яма такова, что малым изменением ее глубины (или размера) можно добиться появления или исчезновения дискретного уровня.

$$2. \quad \sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{th} xa}{xa} - 1 \right)^2, \quad \text{где} \quad x = \frac{\sqrt{2\mu U_0}}{\hbar}.$$

При $U_0 \rightarrow \infty$ $\sigma = 4\pi a^2$, т. е. в 4 раза больше, чем сечение упругого рассеяния на непроницаемой сфере в классической механике.

$$3. \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l + \\ + \frac{6 \cos \delta}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin \delta_l \sin \delta_{l+1} \cos(\delta_{l+1} - \delta_l) + \\ + \frac{5}{k^2} \frac{3 \cos^2 \delta - 1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)} \sin^2 \delta_l + \right. \\ \left. + \frac{3(l+1)(l+2)}{2l+3} \sin \delta_l \sin \delta_{l+2} \cos(\delta_{l+2} - \delta_l) \right\} + \dots$$

или

$$\int_0^\pi d\vartheta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l,$$

$$\int_0^\pi \cos \vartheta d\vartheta = \frac{8\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin \delta_l \sin \delta_{l+1} \cos(\delta_{l+1} - \delta_l),$$

$$\int_0^\pi \frac{3 \cos^2 \vartheta - 1}{2} d\vartheta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l+1)(2l+3)} \sin^2 \delta_l +$$

$$+ \frac{12\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(l+1)(l+2)}{2l+3} \sin \delta_l \sin \delta_{l+2} \cos(\delta_{l+2} - \delta_l).$$

4. Радиальные функции подчиняются уравнению

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu A}{\hbar^2 r^2} \right] \chi = 0$$

и должны удовлетворять условиям $\chi_l(0) = 0$ и конечности при $r \rightarrow \infty$. Удовлетворяющее этим условиям решение имеет следующий вид:

$$\chi_l = \sqrt{r} J_\lambda(kr),$$

где

$$\lambda = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}}.$$

Из формул для асимптотического поведения $J_\lambda(kr)$ находим фазы:

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2} \left(\lambda - l - \frac{1}{2} \right) = -\frac{\pi}{2} \left\{ \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}} - \left(l + \frac{1}{2}\right) \right\}.$$

Независимость δ_l от k означает, что амплитуда рассеяния

$$f(\vartheta, k) = \frac{1}{k} f_0(\vartheta),$$

где $f_0(\vartheta)$ не зависит от энергии рассеиваемых частиц. Сечение рассеяния

$$d\sigma = \frac{1}{k^2} |f_0(\vartheta)|^2 d\Omega$$

обратно пропорционально энергии и характеризуется универсальным угловым распределением.

Поскольку при $\vartheta \rightarrow 0$ сумма, определяющая амплитуду рассеяния

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) [e^{2i\delta_l} - 1],$$

расходится, ясно, что для вычисления $f(\vartheta)$ при малых ϑ существенны большие l . Для больших l имеем:

$$-\delta_l \approx -\frac{\pi\mu A}{(2l+1)\hbar^2} \ll 1, \quad (1)$$

откуда

$$\begin{aligned} f(\vartheta) &\approx \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) \delta_l \approx \\ &\approx -\frac{\pi\mu A}{\hbar^2 k} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta) = -\frac{\pi\mu A}{k\hbar^2} \frac{1}{2 \sin \frac{\vartheta}{2}}. \end{aligned}$$

В том случае, когда

$$\frac{8\mu A}{\hbar^2} \ll 1,$$

выражение (1) для δ_l справедливо при любых l и таким образом для всех ϑ

$$f(\vartheta) \approx -\frac{\pi\mu A}{k\hbar^2} \frac{1}{2 \sin \frac{\vartheta}{2}},$$

$$d\sigma = \frac{\pi^3 \mu A^2}{2\hbar^2 E} \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} d\vartheta.$$

5. Амплитуда рассеяния в борновском приближении имеет вид

$$f_{\text{борн}}(\vartheta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U(r) d\tau = -\frac{\pi\mu A}{\hbar^2 q},$$

где

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Отсюда

$$d\sigma_{\text{борн}} = |f(\vartheta)|^2 d\Omega = \frac{\pi^3 \mu A^2}{2\hbar^2 E} \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} d\vartheta.$$

В классической механике связь между углом рассеяния и прицельным параметром ρ имеет вид

$$\int_{r_0}^{\infty} \frac{\mu v \rho dr}{r^2 \sqrt{2\mu(E-U) - \left(\frac{\mu v \rho}{r}\right)^2}} = \frac{\pi - \vartheta}{2},$$

где r_0 — корень подкоренного выражения. Производя интегрирование, находим:

$$\rho^2 = \frac{A}{E} \frac{1}{\vartheta} \frac{(\pi - \vartheta)^2}{2\pi - \vartheta},$$

откуда

$$d\sigma = -2\pi\rho \frac{d\rho}{d\vartheta} d\vartheta = \frac{2\pi^3 A}{E} \frac{\pi - \vartheta}{\vartheta^2 (2\pi - \vartheta)^2} d\vartheta.$$

При выполнении условия

$$\frac{8\mu A}{\hbar^2} \ll 1$$

борновское приближение применимо для всех углов (ср. с предыдущей задачей).

В обратном предельном случае, если $\frac{8\mu A}{\hbar^2} \gg 1$ классическое выражение применимо для не слишком малых углов

$$\vartheta \gtrsim \frac{\hbar^2}{8\mu A},$$

а для меньших углов

$$\vartheta \lesssim \frac{\hbar^2}{8\mu A},$$

справедливы результаты расчета в борновском приближении.

6. Для радиальной функции имеем уравнение

$$\chi'' + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + U_0 e^{-\frac{r}{a}} \right) \chi = 0.$$

Введем обозначения $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$, $x^2 = \frac{2\mu U_0}{\hbar^2}$ и в качестве независимой переменной выберем $\xi = e^{-\frac{r}{2a}}$. Решениями получающегося при этом уравнения

$$\chi'' + \frac{1}{\xi} \chi' + 4a^2 \left(\frac{k^2}{\xi^2} + x^2 \right) \chi = 0$$

являются бesselевы функции мнимого порядка $\chi = J_{\pm 2aki}(2ax\xi)$. Условие обращения χ в нуль при $r = 0$, т. е. при $\xi = 1$, приводит с точностью до нормировочной постоянной к выражению

$$\chi = J_{-2aki}(2ax) J_{2aki}(2ax\xi) - J_{2aki}(2ax) J_{-2aki}(2ax\xi). \quad (1)$$

Асимптотический вид функции χ при $r \rightarrow \infty$ ($\xi \rightarrow 0$)

$$\chi = J_{-2aki}(2ax) \frac{e^{2aki \ln ax}}{\Gamma(2aki + 1)} e^{-ikr} - J_{2aki}(2ax) \frac{e^{-2aki \ln ax}}{\Gamma(-2aki + 1)} e^{ikr}.$$

Коэффициенты при e^{-ikr} и e^{ikr} можно рассматривать как функции комплексного k . Если их обозначить через $a(k)$ и $b(k)$, то, как нетрудно убедиться, выполняются соотношения

$$\begin{aligned} a(-k) &= -b(k), \\ a^*(k) &= -b(k) \end{aligned}$$

(при взятии комплексно-сопряженной величины k не заменяется на k^*).

Запишем асимптотическое выражение χ в виде

$$\chi = A(e^{-ikr - i\delta_0} - e^{ikr + \delta_0}) = -2iA \sin(kr + \delta_0).$$

Фаза рассеяния δ_0 определяется из соотношения

$$e^{2i\delta_0} = \frac{J_{2aki}(2ax)}{J_{-2aki}(2ax)} \frac{\Gamma(2aki + 1)}{\Gamma(-2aki + 1)} e^{-4aki \ln ax}.$$

Связанному состоянию соответствует чисто мнимое значение $k = ik_n$ (в этом случае энергия отрицательна).

Для $k_n > 0$ коэффициент при $e^{-ikr} = e^{k_n r}$ в первом слагаемом асимптотического выражения для χ должен обращаться в нуль. Таким образом, либо $J_{2ak_n}(2ax) = 0$, либо $\frac{1}{\Gamma(2ak_n + 1)} = 0$. Из второго условия следует:

$$2ak_n + 1 = -n \quad (n = 0, 1, 2, \dots),$$

т. е.

$$E = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2 (n+1)^2}{8\mu a^2},$$

однако при этом индексы бesselевых функций становятся целыми числами и, так как $J_n(x) = (-1)^n J_{-n}(x)$, два реше-

ния оказываются линейно зависимыми и волновая функция (1) обращается тождественно в нуль. Поэтому полученные уровни энергии являются фиктивными. Первое условие дает истинный дискретный спектр задачи:

$$J_{2\alpha k_n}(2\alpha x) = 0, \quad E_n = -\frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu}. \quad (2)$$

Таким образом, нули выражения $e^{2i\delta_0(k)}$ лежат на мнимой оси и, помимо значений ik_n , соответствующих дискретным уровням (2), содержат лишние нули.

$$8. \text{ а) } d\sigma = \left(\frac{g^2}{2E}\right)^2 \frac{d\Omega}{\left(\sin^2 \frac{\vartheta}{2} + \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu E}\right)^2}; \quad \sigma = \frac{\pi \mu^2 g^4}{\hbar^2 \alpha^2 (2\mu E + \hbar^2 \alpha^2)};$$

$$\text{б) } d\sigma = \frac{\pi \mu^2 U_0}{4\hbar^4 \alpha^6} e^{-\frac{4\mu E}{\hbar^2 \alpha^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} d\Omega;$$

$$\sigma = \frac{\pi^2 U_0^2 \mu}{4\hbar^2 \alpha^4 E} \left(1 - e^{-\frac{4\mu E}{\hbar^2 \alpha^2}}\right);$$

$$\text{в) } d\sigma = \frac{16\mu^2 U_0^2}{\hbar^4} \frac{\alpha^2}{(\alpha^2 + q^2)^4} d\Omega,$$

$$\sigma = \frac{64\pi \mu^2 U_0}{3 \hbar^4} \frac{16k^4 + 12k^2 \alpha^2 + 3\alpha^4}{\alpha^4 (\alpha^2 + 4k^2)^3}.$$

9. а) Вычисляем атомный формфактор для водорода

$$F(q) = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) d\tau = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r} - \frac{2r}{a}} d\tau = \frac{1}{\left(1 + \frac{q^2 a^2}{4}\right)^2}$$

$$\left(a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \text{ — борковский радиус}\right).$$

Отсюда находим дифференциальное сечение

$$d\sigma = \frac{4a^2 (8 + q^2 a^2)^2}{(4 + q^2 a^2)^4} d\Omega \quad \left(q = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}\right) \quad (1)$$

и полное сечение

$$\sigma = \frac{\pi a^2}{3} \frac{7k^4 a^4 + 18k^2 a^2 + 12}{(k^2 a^2 + 1)^3}.$$

Условие применимости борновского приближения принимает в данном случае вид

$$ka \gg 1,$$

поэтому последняя формула упрощается

$$\sigma = \frac{7\pi}{3k^2}. \quad (2)$$

б) Для атома гелия распределение плотности электронов, найденное с помощью вариационного расчета, имеет следующий вид:

$$n(r) = \frac{2}{\pi b^3} e^{-\frac{2r}{b}}, \quad b = \frac{16}{27} a.$$

Дифференциальное и полное сечение упругого рассеяния на атоме гелия в этом приближении имеет тот же вид, что и для рассеяния на атоме водорода. Нужно лишь в формулах (1) и (2) заменить a на b и ввести общий множитель $Z^2=4$. В частности,

$$\sigma = \frac{28\pi}{3k^2}.$$

10. Волновая функция системы из двух одинаковых частиц имеет вид произведения орбитальной и спиновой функций. Независимо от того, является ли спин частиц целым или полуцелым, четному суммарному спину соответствует симметричная орбитальная волновая функция, а нечетному—антисимметричная.

После перехода к системе центра инерции и отделения переменной центра тяжести орбитальная волновая функция принимает вид

$$\Psi(r_1, r_2) = \varphi(R) \psi(\rho),$$

где

$$R = \frac{r_1 + r_2}{2}, \quad \rho = r_1 - r_2.$$

При замене r_1 на r_2 функция $\varphi(R)$, описывающая движение центра тяжести, очевидно, не меняется. Таким образом, волновая функция относительного движения двух частиц должна быть четной

$$\psi(\rho) = \psi(-\rho)$$

в том случае, если суммарный спин S четен, и нечетной

$$\psi(\rho) = -\psi(-\rho),$$

если спин S нечетен.

Невозмущенную волновую функцию можно записать в виде

$$\psi(\rho) = e^{ik_0\rho} + e^{-ik_0\rho}, \quad (1)$$

если S — четное, и

$$\psi(\rho) = e^{ik_0\rho} - e^{-ik_0\rho}, \quad (2)$$

если S — нечетное. В результате взаимодействия частиц возникает рассеянная волна $\frac{F(\vartheta)}{\rho} e^{ik\rho}$, где ϑ — угол между k_0 и направлением, в котором разлетаются частицы в системе центра инерции. Амплитуду рассеяния можно выразить через амплитуду рассеяния частицы с массой, равной приведенной массе обеих частиц в поле $U(r)$. Действительно, $\psi(\rho)$ удовлетворяет уравнению

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{\mu} (\Delta_\rho + k^2) - U(\rho) \right\} \psi(\rho) = 0.$$

Если падающей волне $e^{ik_0\rho}$ соответствует рассеянная $\frac{f(\vartheta)}{r} e^{ik\rho}$, то для падающей волны (1)

$$F_0(\vartheta) = f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta) \quad (\text{спин четен}),$$

а для (2)

$$F_1(\vartheta) = f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta) \quad (\text{спин нечетен}).$$

Вероятность рассеяния одной из частиц в телесном угле $d\Omega$ (при этом другая частица движется в противоположном направлении), отнесенная к плотности падающего потока:

$$d\sigma_0 = |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2,$$

$$d\sigma_1 = |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2.$$

Амплитуда $f(\vartheta)$ выражается через фазы рассеяния δ_l по формуле

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) [e^{2i\delta_l} - 1].$$

Принимая во внимание, что

$$P_l(\cos(\pi - \vartheta)) = P_l(-\cos \vartheta) = (-1)^l P_l(\cos \vartheta),$$

находим:

$$F_0(\vartheta) = \frac{1}{ik} \sum_{\text{четные } l} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) [e^{2i\delta_l} - 1],$$

$$F_1(\vartheta) = \frac{1}{ik} \sum_{\text{нечетные } l} (2l+1) P_l(\cos \vartheta) [e^{2i\delta_l} - 1].$$

Для медленных частиц наибольший вклад в рассеяние вносят малые l . В случае четного суммарного спина сечение (как и при рассеянии различных частиц) сферически симметрично и не обращается в нуль при $k \rightarrow 0$.

Если же суммарный спин нечетный, то сечение определяется членом с $l=1$. Поскольку $\delta_l \sim k^{2l+1}$ для малых волновых чисел k , сечение обращается в нуль как E^2 (при $E \rightarrow 0$) и имеет угловую зависимость $\sim \cos^2 \vartheta$.

11. В случае кулоновского поля амплитуда рассеяния *)

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{2k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} e^{-\frac{2i}{k} \ln \sin \frac{\vartheta}{2}} \frac{\Gamma\left(1 + \frac{l}{k}\right)}{\Gamma\left(1 - \frac{l}{k}\right)}.$$

Воспользовавшись результатом предыдущей задачи, найдем дифференциальное сечение рассеяния в случае четного спина

$$\begin{aligned} d\sigma_0 &= |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2 d\Omega = \\ &= \frac{1}{4k^4} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{2 \cos\left(\frac{2}{k} \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}\right)}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \right\} d\Omega. \end{aligned}$$

Эта формула дает сечение рассеяния α -частиц, у которых спин равен нулю.

В случае двух электронов возможно состояние с суммарным спином 1. Тогда дифференциальное сечение

$$\begin{aligned} d\sigma_1 &= |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2 = \\ &= \frac{1}{4k^4} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} - \frac{2 \cos\left(\frac{2}{k} \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}\right)}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \right\} d\Omega. \end{aligned}$$

*) В кулоновских единицах.

Если рассеивающиеся электроны не поляризованы, то возможны три значения проекции суммарного спина вдоль некоторого направления z : $S_z = 0$, $S_z = 1$, $S_z = -1$ и два значения полного спина $S = 0$ и $S = 1$. Вероятность каждого из значений проекций $W_{-1} = \frac{1}{4}$, $W_0 = \frac{1}{2}$, $W_{+1} = \frac{1}{4}$. Значения $S_z = +1$ или $S_z = -1$ соответствуют непременно полному спину $S = 1$. Поскольку различные значения проекции для $S = 1$ равновероятны, то вероятность $S_z = 0$ при полном спине 1, так же как и для $S_z = \pm 1$, равна $\frac{1}{4}$. Таким образом, вероятность того, что полный спин $S = 0$, равна $w_0 = \frac{1}{4} = \frac{1}{4}$, а вероятность $S = 1$ равна $\frac{3}{4}$. Поэтому для неполяризованных пучков электронов

$$d\sigma = \frac{1}{4} d\sigma_0 + \frac{3}{4} d\sigma_1 =$$

$$= \frac{1}{4k^4} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} - \frac{\cos \left(\frac{2}{k} \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} \right)}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \right\} d\Omega.$$

Последний интерференционный член в фигурных скобках характерен для рассеяния тождественных частиц. При $\hbar \rightarrow 0$ формула для $d\sigma$ должна переходить в классическую формулу Резерфорда, которая для системы центра инерции имеет вид

$$d\sigma = \frac{1}{4k^4} \left\{ \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} \right\} d\Omega.$$

Переход к этой формуле происходит необычно. При выполнении условия $\frac{e^2}{\hbar v} \gg 1$, когда применимо классическое рассмотрение, интерференционный член, имеющий в обычных единицах вид

$$\frac{\cos \left(\frac{2e^2}{\hbar v} \ln \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} \right)}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}},$$

быстро осциллирует. Таким образом, квантовое дифференциальное сечение для строго фиксированного ϑ существенно отличается от классического даже для больших значений $\frac{e^2}{\hbar v}$. Однако при усреднении по небольшому интервалу углов $\Delta\vartheta \sim \frac{\hbar v}{e^2}$ интерференционный член обращается в нуль и квантовая формула переходит в классическую.

12.

$$\hat{f}^2 = \frac{3}{4} f_3^2 + \frac{1}{4} f_1^2 + \frac{1}{4} (f_3^2 - f_1^2) (\hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p).$$

Среднее значение оператора $(\hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p)$ в состоянии, характеризуемом спиновой функцией

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \cos \beta \\ e^{i\alpha} \sin \beta \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p,$$

равно

$$\overline{(\hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_p)} = \cos^2 \beta - \sin^2 \beta.$$

Таким образом, для сечения рассеяния находим выражение

$$\sigma = \pi \{ 3f_3^2 + f_1^2 - (f_3^2 - f_1^2) \cos 2\beta \}$$

или

$$\sigma = \left\{ \frac{3}{4} \sigma_{\text{трипл}} + \frac{1}{4} \sigma_{\text{сингл}} - \frac{\cos 2\beta}{4} (\sigma_{\text{трипл}} - \sigma_{\text{сингл}}) \right\}.$$

В случае неполяризованного пучка нейтронов сечение равно

$$\sigma = \frac{3}{4} \sigma_{\text{трипл}} + \frac{1}{4} \sigma_{\text{сингл}},$$

поскольку $\overline{\cos 2\beta} = 0$.

13. Спиновое состояние нейтрона и протона до взаимодействия описывается функцией

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p.$$

Эту функцию разложим по спиновым функциям синглетного

и триплетного состояний

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} \right]. \end{aligned}$$

Рассеянная волна имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[f_3 \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} + \right. \\ \left. + f_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\} \right] \end{aligned}$$

или

$$\frac{e^{ikr}}{r} \left\{ \frac{f_3 + f_1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p + \frac{f_3 - f_1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \right\}$$

отсюда следует, что вероятность переориентации равна

$$\frac{1}{2} \frac{(f_3 - f_1)^2}{f_3^2 + f_1^2}.$$

14. Введем оператор суммарного спина двух протонов

$$\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{p_1} + \hat{\sigma}_{p_2}) = \hat{S}.$$

Как легко показать,

$$(\hat{\sigma}_n \hat{S})^2 = \hat{S}^2 - (\hat{\sigma}_n \hat{S}).$$

С учетом последнего соотношения выражение для \hat{f}^2 примет вид

$$\hat{f}^2 = \frac{1}{4} \{ (f_1 + 3f_3)^2 + (5f_3^2 - 2f_3f_1 - 3f_1^2) (\hat{\sigma}_n \hat{S}) + (f_3 - f_1)^2 \hat{S}^2 \}.$$

В случае рассеяния на параводороде сечение равно

$$\sigma_{\text{пара}} = \pi (f_1 + 3f_3)^2.$$

Естественно, что это сечение не зависит от поляризации падающих нейтронов, поскольку нет физически выделенного направления в пространстве.

Сечение рассеяния на ортоводороде равно

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{орто}} = \pi \{ (f_1 + 3f_3)^2 + \\ + (5f_3^2 - 2f_3f_1 - 3f_1^2) \cos 2\beta + 2(f_3 - f_1)^2 \}, \end{aligned}$$

где 2β — угол между направлениями суммарного спина двух протонов и спина нейтрона.

Если пучок нейтронов не поляризован, то среднее значение $\cos 2\beta$ по смешанному ансамблю равно нулю и $\sigma^{\text{орто}}$ примет вид

$$\sigma^{\text{орто}} = \pi \{ (f_1 + 3f_3)^2 + 2(f_3 - f_1)^2 \},$$

а отношение сечений будет равно

$$\frac{\sigma^{\text{орто}}}{\sigma^{\text{пара}}} = 1 + 2 \left(\frac{f_3 - f_1}{f_1 + 3f_3} \right)^2.$$

15. Радиальные функции, удовлетворяющие граничному условию $\chi_l(a) = 0$, выражаются следующим образом через бесселевы функции:

$$\chi_l = \sqrt{r} \{ J_{-l-1/2}(ka) J_{l+1/2}(kr) - J_{l+1/2}(ka) J_{-l-1/2}(kr) \}.$$

Из формул для асимптотического поведения бесселевых функций находим фазы рассеяния

$$\text{ctg } \delta_l = (-1)^{l+1} \frac{J_{-l-1/2}(ka)}{J_{l+1/2}(ka)}.$$

Отсюда полное сечение упругого рассеяния

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{J_{l+1/2}^2(ka)}{J_{l+1/2}^2(ka) + J_{-l-1/2}^2(ka)} \approx 2\pi a^2.$$

17. На больших расстояниях от мишени (мишень состоит из скалярных частиц) волновая функция падающих частиц имеет вид

$$e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \approx \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} l^{l+1} (2l+1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} P_l(\cos \vartheta) \times \\ \times \left\{ e^{-i(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} \right\}. \quad (1)$$

Разложим функцию $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} P_l(\cos \vartheta)$ по собственным функциям

оператора \hat{j}^2 . В результате разложения получим:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} P_l(\cos \theta) &= \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} Y_{l0}(\theta) = \\ &= \frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{2l+1}} \{ \sqrt{l+1} \Psi_l^+ + \sqrt{l} \Psi_l^- \}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь через Ψ_l^+ и Ψ_l^- мы обозначили функции Паули

$$\Psi_l^+ = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1} Y_{l0} \\ \sqrt{l} Y_{l1} \end{pmatrix} \quad \left(j = l + \frac{1}{2}, l, j_z = \frac{1}{2} \right),$$

$$\Psi_l^- = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l} Y_{l0} \\ -\sqrt{l+1} Y_{l1} \end{pmatrix} \quad \left(j = l - \frac{1}{2}, l, j_z = \frac{1}{2} \right)$$

(см. задачу 20 § 4).

Подставляя (2) в (1), имеем:

$$\begin{aligned} e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &\approx \frac{\sqrt{\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} l^{l+1} \{ \sqrt{l+1} \Psi_l^+ + \sqrt{l} \Psi_l^- \} \times \\ &\times \left\{ e^{-(kr - \frac{\pi l}{2})} - e^{i(kr - \frac{\pi l}{2})} \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

В результате взаимодействия изменится только расходящаяся волна $\frac{e^{ikr}}{r}$.

Так как при любом законе взаимодействия этих частиц \hat{j}^2 , \hat{l}^2 и \hat{j}_z будут интегралами движения (см. задачу 39 § 4), то изменение в общем случае будет различно для состояний с различными квантовыми числами j , l . Для рассеянной волны получим выражение следующего вида:

$$\begin{aligned} \Psi_s &\approx \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \{ \sqrt{l+1} (\eta_l^+ - 1) \Psi_l^+ + \sqrt{l} (\eta_l^- - 1) \Psi_l^- \}, \\ \eta_l^+ &= \eta \left(j = l + \frac{1}{2}, l \right), \\ \eta_l^- &= \eta \left(j = l - \frac{1}{2}, l \right) \end{aligned}$$

или

$$\Psi_s \approx \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \times \\ \times \left\{ \binom{1}{0} Y_{l0} [(l+1)(\eta_l^+ - 1) + l(\eta_l^- - 1)] + \binom{0}{1} Y_{l1} (\eta_l^+ - \eta_l^-) \right\}.$$

Отсюда видно, что переориентация спина частицы может произойти в том случае, когда $\eta_l^+ \neq \eta_l^-$. Выразим сечение рассеяния через η_l^+ и η_l^- .

Дифференциальное сечение рассеяния с изменением поляризации $d\sigma_1$ равно

$$d\sigma_1 = \frac{\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{l(l+1)}{2l+1}} (\eta_l^+ - \eta_l^-) Y_{l1} \right|^2 d\Omega,$$

а сечение $d\sigma_2$ без изменения поляризации равно

$$d\sigma_2 = \frac{\pi}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} Y_{l0} \{ (l+1)(\eta_l^+ - 1) + l(\eta_l^- - 1) \} \right|^2 d\Omega.$$

Когда относительная скорость частиц не велика, нужно принимать во внимание рассеяния только S - и P -волн

$$(|\eta_l^+ - 1| \ll 1, \quad |\eta_l^- - 1| \ll 1, \quad \text{если } l > 1).$$

В этом случае

$$d\sigma_1 \approx \frac{1}{4k^2} (\eta_1^+ - \eta_1^-) \sin^2 \vartheta d\Omega,$$

$$d\sigma_2 \approx \frac{1}{4k^2} |\cos \vartheta (2\eta_1^+ + \eta_1^- - 1) + \eta_0^+ - 1|^2 d\Omega.$$

Из выражения для $d\sigma_1$ видно, что частицы, изменившие ориентацию спина, рассеиваются главным образом в направлении, перпендикулярном оси z .

19. Поскольку $R \gg \lambda$, то можно применять квазиклассические соображения. В ядро попадают все частицы с $l \leq \frac{R}{\lambda}$,

следовательно,

$$\eta_{il} = 0 \quad \text{для } l < \frac{R}{\lambda},$$

$$\eta_{il} = 1 \quad \text{для } l > \frac{R}{\lambda}.$$

Подставляя значение η_{il} в выражение для полных сечений

$$\sigma_r = \pi\lambda^2 \sum (2l+1)(1 - |\eta_{il}|^2), \quad \sigma_s = \pi\lambda^2 \sum (2l+1)|1 - \eta_{il}|^2,$$

имеем:

$$\sigma_r = \sigma_s = \pi\lambda \sum_{l=0}^{\frac{R}{\lambda}} (2l+1) \approx \pi R^2.$$

Таким образом, полное сечение $\sigma = \sigma_r + \sigma_s$ равно удвоенному геометрическому сечению ядра.

20. Во всех трех случаях распределение изотропно.

21. Собственные функции оператора I_z для системы мезон — нуклон записываются как всевозможные произведения функций φ и ψ . При этом, φ относится к различным зарядовым состояниям мезона (φ_+ , φ_0 , φ_-), а ψ — нуклона (ψ_p , ψ_n). Всего таких функций будет шесть:

| | | |
|---|--|--|
| $(p^+) = \varphi_+ \psi_p$ $I_z = \frac{3}{2}$ | $(p^0) = \varphi_0 \psi_p$ $I_z = \frac{1}{2}$ | $(p^-) = \varphi_- \psi_p$ $I_z = -\frac{1}{2}$ |
| $(n^+) = \varphi_+ \psi_n$ $I_z = \frac{1}{2}$ | $(n^0) = \varphi_0 \psi_n$ $I_z = -\frac{1}{2}$ | $(n^-) = \varphi_- \psi_n$ $I_z = -\frac{3}{2}$ |

Здесь (p^+) обозначает функцию системы, составленной из π^+ -мезона и протона; (n^+) — функцию, составленную из π^+ -мезона и нейтрона и т. д. Эти функции, вообще говоря, не являются собственными функциями оператора квадрата полного изотопического спина системы I^2 .

Собственные функции I^2 , одновременно принадлежащие заданному I_z , будут линейными комбинациями из вышенаписанных функций, взятых с коэффициентами Клебша — Жордана.

Коэффициенты Клебша — Жордана для $m' = \pm 1/2$ имеют вид (см. задачу 20 § 4)

| | $m' = \frac{1}{2}$ | $m' = -\frac{1}{2}$ |
|-----------------------|--|---|
| $I = j + \frac{1}{2}$ | $\sqrt{\frac{j + M + \frac{1}{2}}{2j + 1}}$ | $\sqrt{\frac{j - M + \frac{1}{2}}{2j + 1}}$ |
| $I = j - \frac{1}{2}$ | $-\sqrt{\frac{j - M + \frac{1}{2}}{2j + 1}}$ | $\sqrt{\frac{j + M + \frac{1}{2}}{2j + 1}}$ |

В нашем случае $M = I_z$, $j = 1$, $m' = \tau_z$.

Пользуясь этой таблицей, получаем собственные функции $\Phi_{I_z}^I$ операторов I^2 и I_z :

$$\begin{aligned}\Phi_{3/2}^{3/2} &= (p^+), \\ \Phi_{1/2}^{3/2} &= \sqrt{\frac{2}{3}}(p^0) + \sqrt{\frac{1}{3}}(n^+), \\ \Phi_{-1/2}^{3/2} &= \sqrt{\frac{1}{3}}(p^-) + \sqrt{\frac{2}{3}}(n^0), \\ \Phi_{-3/2}^{3/2} &= (n^-), \\ \Phi_{1/2}^{1/2} &= -\sqrt{\frac{1}{3}}(p^0) + \sqrt{\frac{2}{3}}(n^+), \\ \Phi_{-1/2}^{1/2} &= -\sqrt{\frac{2}{3}}(p^-) + \sqrt{\frac{1}{3}}(n^0).\end{aligned}$$

Отсюда легко выразить собственные функции системы мезон — нуклон через собственные функции I^2 и I_z . Они оказываются равными:

$$\begin{aligned}(p^+) &= \Phi_{3/2}^{3/2}, & (n^+) &= \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi_{1/2}^{3/2} + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{1/2}^{1/2}, \\ (p^0) &= \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{1/2}^{3/2} - \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi_{1/2}^{1/2}, & (n^0) &= \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{-1/2}^{3/2} + \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi_{-1/2}^{1/2}, \\ (p^-) &= \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi_{-1/2}^{3/2} - \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{-1/2}^{1/2}, & (n^-) &= \Phi_{-3/2}^{3/2}.\end{aligned}$$

22. Разложение падающей волны имеет вид

$$\begin{aligned} \psi &= e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z) \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr} = \\ &= 2\sqrt{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I i^l \sqrt{2l+1} Y_{l0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)}{kr}, \quad (1) \end{aligned}$$

где $C_{I_z}^{I\tau_z}$ — коэффициенты Клебша — Жордана, определяемые из таблицы

| | $\tau_z = \frac{1}{2}$ | $\tau_z = -\frac{1}{2}$ |
|-----------------|---------------------------------------|--------------------------------------|
| $C_{I_z}^{3/2}$ | $\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{I_z}{3}}$ | $\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{I_z}{3}}$ |
| $C_{I_z}^{1/2}$ | $-\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{I_z}{3}}$ | $\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{I_z}{3}}$ |

(2)

Здесь мы учли, что (см. задачу 21)

$$\delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z) = \sum_I C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I.$$

Введем функции Паули для $m_j = 1/2$ (см. задачу 17 § 9):

$$Y_l^+ = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} Y_{l0} \\ -\sqrt{\frac{l}{2l+1}} Y_{l1} \end{pmatrix}; \quad Y_l^- = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l}{2l+1}} Y_{l0} \\ \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}} Y_{l1} \end{pmatrix}$$

и разложим по ним $Y_{l0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$:

$$Y_{l0} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} (\sqrt{l+1} Y_l^+ + \sqrt{l} Y_l^-). \quad (3)$$

Подставляя (3) в (1), получаем:

$$\begin{aligned}
 \psi &= \frac{2\sqrt{\pi}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I i^l (\sqrt{l+1}Y_l^+ + \sqrt{l}Y_l^-) \times \\
 &\quad \times \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) C_{I_z}^{I_z} \Phi_{I_z}^I = \\
 &= \frac{\sqrt{\pi}}{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I (\sqrt{l+1}Y_l^+ + \sqrt{l}Y_l^-) \times \\
 &\quad \times C_{I_z}^{I_z} \Phi_{I_z}^I (e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}) = \\
 &= \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I C_{I_z}^{I_z} \Phi_{I_z}^I (\sqrt{l+1}Y_l^+ + \sqrt{l}Y_l^-) \frac{e^{ikr}}{r} - \\
 &- \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_I C_{I_z}^{I_z} \Phi_{I_z}^I (\sqrt{l+1}Y_l^+ + \sqrt{l}Y_l^-) \times \\
 &\quad \times (-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

23. Воспользуемся разложением падающей волны по собственным функциям сохраняющихся операторов (см. формулу (4) предыдущей задачи).

Каждый член этой суммы, соответствующий определенным значениям (l, J, I) , будет рассеиваться независимо от других.

Следовательно, число частиц, обладающих (l, J, I) , в процессе упругого рассеяния не меняется, поэтому влияние рассеивающего центра сводится к умножению на некоторый

фазовый множитель $e^{2i\delta_{l\pm}^I}$. Здесь $\delta_{l\pm}^I = \delta_{l, J=l\pm\frac{1}{2}}^I$ зависит

от l, J, I и не зависит от I_z вследствие гипотезы об изотопической инвариантности.

Следует заметить, что рассеивающий центр не влияет на сходящиеся волны, а влияет только на расходящиеся. Тогда волновая функция системы с учетом рассеяния запишется

В виде

$$\begin{aligned} \psi = & \frac{V\pi}{ik} \sum_I \sum_{l=0}^{\infty} C_{I_z}^{I\tau_z} \times \\ & \times \Phi_{I_z}^I \left(\sqrt{l+1} Y_l^+ e^{2i\delta_{l+}^I} + \sqrt{l} Y_l^- e^{2i\delta_{l-}^I} \right) \frac{e^{ikr}}{r} - \\ & - \frac{V\pi}{ik} \sum_I \sum_{l=0}^{\infty} C_{I_z}^{I\tau_z} \Phi_{I_z}^I \left(\sqrt{l+1} Y_l^+ + \sqrt{l} Y_l^- \right) \frac{e^{-4kr}}{r}. \quad (1) \end{aligned}$$

На больших расстояниях от рассеивающего центра ее можно представить в виде

$$\psi = \psi_{\text{пад}} + f \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Здесь f — амплитуда рассеяния. Отсюда, вычитая из (1) выражение для $\psi_{\text{пад}}$ (см. формулу (4) задачи 22 § 9), получим:

$$\begin{aligned} f = & \frac{V\pi}{ik} \sum_I \sum_{l=0}^{\infty} C_{I_z}^{I\tau_z} \times \\ & \times \Phi_{I_z}^I \left\{ \sqrt{l+1} Y_l^+ \left(e^{2i\delta_{l+}^I} - 1 \right) + \sqrt{l} Y_l^- \left(e^{2i\delta_{l-}^I} - 1 \right) \right\}. \quad (2) \end{aligned}$$

Функции $\Phi_{I_z}^I$ разложим по собственным функциям оператора I_z

$$\Phi_{I_z}^I = C_{I_z}^{I\tau_z} \delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z) + C_{I_z}^{I-\tau_z} \delta(\pi - \pi_k) \delta(n + \tau_z), \quad (3)$$

где коэффициенты Клебша — Жордана $C_{I_z}^{I\tau_z}$ определяются из таблицы (2) задачи 22, а $\pi_k = \pi_i + 2\tau_z$.

Подставляя (3) в (2), получим:

$$\begin{aligned} f = & \frac{V\pi}{ik} \sum_I \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ G_{I_z}^{I\tau_z} \delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z) + G_{I_z}^{I-\tau_z} \times \right. \\ & \times \delta(\pi - \pi_k) \delta(n + \tau_z) \left. \right\} \times \\ & \times \left\{ \sqrt{l+1} Y_l^+ \left(e^{2i\delta_{l+}^I} - 1 \right) + \sqrt{l} Y_l^- \left(e^{2i\delta_{l-}^I} - 1 \right) \right\}, \end{aligned}$$

где

$$G_{I_z \tau_z}^{I \tau_z} = C_{I_z}^{I \tau_z} C_{I_z}^{I \tau_z'}$$

и τ_z' обозначает конечное состояние нуклона.

Тогда, полагая:

$$f = f_{\tau_z}^{\tau_z'} \delta(\pi - \pi_i) \delta(n - \tau_z) + \\ + f_{\tau_z}^{\tau_z'} \delta(\pi - \pi_k) \delta(n + \tau_z),$$

получим:

$$f_{\tau_z}^{\tau_z'} = \frac{V\pi}{ik} \sum_I \sum_{l=0}^{\infty} G_{I_z \tau_z}^{I \tau_z'} \left\{ \sqrt{l+1} Y_l^+ \left(e^{2i\delta_l^+} - 1 \right) + \right. \\ \left. + \sqrt{l} Y_l^- \left(e^{2i\delta_l^-} - 1 \right) \right\}, \quad (4)$$

где $G_{I_z \tau_z}^{I \tau_z'}$ для требуемых в задаче реакций даны в следующей таблице:

| Реакция | $p^+ \rightarrow p^+$ | $p^- \rightarrow p^-$ | $p^- \rightarrow n^0$ |
|-------------------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| $G_{I_z \tau_z}^{3/2 \tau_z}$ | 1 | $\frac{1}{3}$ | $\frac{\sqrt{2}}{3}$ |
| $G_{I_z \tau_z}^{1/2 \tau_z}$ | 0 | $\frac{2}{3}$ | $-\frac{\sqrt{2}}{3}$ |

Подставляя эти значения $G_{I_z \tau_z}^{I \tau_z'}$ в (4), окончательно полу-

чаем:

$$\begin{aligned}
 f(p^+, p^+) &= \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{l+1} Y_l^+ \left(e^{2i\delta_l^+} - 1 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{l} Y_l^- \left(e^{2i\delta_l^-} - 1 \right) \right\}, \\
 f(p^-, p^-) &= \frac{\sqrt{\pi}}{3ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{l+1} Y_l^+ \left(e^{2i\delta_l^+} + 2e^{2i\delta_l^-} - 3 \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{l} Y_l^- \left(e^{2i\delta_l^+} + 2e^{2i\delta_l^-} - 3 \right) \right\}, \\
 f(p^-, n_0) &= \frac{\sqrt{2\pi}}{3ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{l+1} Y_l^+ \left(e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-} \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{l} Y_l^- \left(e^{2i\delta_l^+} - e^{2i\delta_l^-} \right) \right\}.
 \end{aligned} \tag{5}$$

24. Таблица коэффициентов $G_{I_z \tau_z}^{I_z \tau_z}$ для всех возможных реакций мезонов с нуклонами имеет вид

| № п/п | Реакция | I_z | $G_{I_z \tau_z}^{3/2 \tau_z}$ | $G_{I_z \tau_z}^{1/2 \tau_z}$ |
|-------|-----------------------|-------|-------------------------------|-------------------------------|
| 1 | $p^+ \rightarrow p^+$ | 3/2 | 1 | 0 |
| 2 | $p^0 \rightarrow p^0$ | 1/2 | 2/3 | 1/3 |
| 3 | $p^0 \rightarrow n^+$ | 1/2 | $\sqrt{2}/3$ | $-\sqrt{2}/3$ |
| 4 | $p^- \rightarrow n^0$ | -1/2 | $\sqrt{2}/3$ | $-\sqrt{2}/3$ |
| 5 | $p^- \rightarrow p^-$ | -1/2 | 1/3 | 2/3 |
| 6 | $n^+ \rightarrow n^+$ | 1/2 | 1/3 | 2/3 |
| 7 | $n^0 \rightarrow p^-$ | -1/2 | $\sqrt{2}/3$ | $-\sqrt{2}/3$ |
| 8 | $n^+ \rightarrow p^0$ | 1/2 | $\sqrt{2}/3$ | $-\sqrt{2}/3$ |
| 9 | $n^0 \rightarrow n^0$ | -1/2 | 2/3 | 1/3 |
| 10 | $n^- \rightarrow n^-$ | -3/2 | 1 | 0 |

(1)

Так как фазы не зависят от I_z в силу гипотезы об изотопической инвариантности, то из таблицы (1) и формулы (4) задачи 23 § 9 непосредственно следует:

- 1) $f(p^+, p^+) = f(n^-, n^-)$,
- 2) $f(p^-, p^-) = f(n^+, n^+)$,
- 3) $f(p^0, n^+) = f(n^+, p^0) = f(p^-, n^0) = f(n^0, p^-)$,
- 4) $f(p^0, p^0) = f(n^0, n^0)$.

Выражения для первых трех амплитуд даны в задаче 23. Из таблицы (1) легко видеть, что

$$f(p^0, p^0) = \frac{i}{2} [f(p^+, p^+) + f(p^-, p^-)].$$

Пользуясь таблицей (1), получаем:

- 1) $f(p^+, p^+) = f(n^-, n^-) = f^{3/2}$,
- 2) $f(p^-, p^-) = f(n^+, n^+) = \frac{1}{3} [f^{3/2} + 2f^{1/2}]$,
- 3) $f(p^0, n^+) = f(n^+, p^0) =$
 $= f(p^-, n^0) = f(n^0, p^-) = \frac{\sqrt{2}}{3} [f^{3/2} - f^{1/2}]$,
- 4) $f(p^0, p^0) = f(n^0, n^0) = \frac{1}{3} [2f^{3/2} + f^{1/2}]$.

25. Дифференциальное сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2, \quad \text{где} \quad d\Omega = \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.$$

Полное сечение рассеяния:

$$\sigma = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |f|^2 \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.$$

Подставляя сюда амплитуды рассеяния указанных реакций, найденные в задаче 23 и учтя ортонормированность функций

Паули

$$\int \int (Y_i^+)^+ (Y_{i'}^+) d\Omega = \int \int (Y_i^-)^+ (Y_{i'}^-) d\Omega = \delta_{ii'},$$

$$\int \int (Y_i^+)^+ (Y_{i'}^-) d\Omega = \int \int (Y_i^-)^+ (Y_{i'}^+) d\Omega = 0,$$

получаем:

$$\sigma(p^+, p^+) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \{ (l+1) \sin^2 \delta_{l+}^{3/2} + l \sin^2 \delta_{l-}^{3/2} \},$$

$$\begin{aligned} \sigma(p^-, p^-) = & \frac{4\pi}{3k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \{ (l+1) \times \\ & \times \left[\sin^2 \delta_{l+}^{3/2} + 2 \sin^2 \delta_{l+}^{1/2} - \frac{2}{3} \sin^2 (\delta_{l+}^{3/2} - \delta_{l+}^{1/2}) \right] + \\ & + l \left[\sin^2 \delta_{l-}^{3/2} + 2 \sin^2 \delta_{l-}^{1/2} - \frac{2}{3} \sin^2 (\delta_{l-}^{3/2} - \delta_{l-}^{1/2}) \right] \}, \end{aligned}$$

$$\sigma(p^-, n^0) = \frac{8\pi}{9k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \{ (l+1) \sin^2 (\delta_{l+}^{3/2} - \delta_{l+}^{1/2}) + l \sin^2 (\delta_{l-}^{3/2} - \delta_{l-}^{1/2}) \}.$$

26. Дадим подробное решение для реакции (p^+, p^+) . Амплитуда рассеяния для S - и P -волн имеет вид (см. задачу 23 § 9):

$$f(p^+, p^+) = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \{ \alpha_0 Y_0^+ + \sqrt{2} \alpha_1 Y_1^+ + \beta_1 Y_1^- \},$$

где

$$\alpha_0 = e^{2i\delta_0^{3/2}} - 1; \quad \alpha_1 = e^{2i\delta_1^{3/2}} - 1; \quad \beta_1 = e^{2i\delta_1^{1/2}} - 1.$$

Тогда дифференциальное сечение рассеяния для S - и P -волн равно (здесь учтены явные выражения для функций Паули (см. задачу 22 § 9))

$$\begin{aligned} \frac{k^2}{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} = & |Y_{00}|^2 |\alpha_0|^2 + \\ & + \frac{1}{\sqrt{3}} |Y_{00}| |Y_{10}| \{ 2(\alpha_0 \alpha_1^* + \alpha_0^* \alpha_1) + (\alpha_0 \beta_1^* + \alpha_0^* \beta_1) \} + \\ & + \frac{1}{3} |Y_{10}|^2 \{ 4|\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 + 2(\alpha_1 \beta_1^* + \alpha_1^* \beta_1) \} + \\ & + \frac{2}{3} |Y_{11}|^2 \{ |\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 - (\alpha_1 \beta_1^* + \alpha_1^* \beta_1) \}. \end{aligned}$$

Так как шаровые функции Y_{lm} равны

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi},$$

то дифференциальное сечение запишется в виде

$$k^2 \frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B \cos \theta + C \cos^2 \theta, \quad (1)$$

где коэффициенты A , B , C равны

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{4} \{ |\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 - (\alpha_1 \beta_1^* + \alpha_1^* \beta_1) \}; \\ B &= \frac{1}{4} \{ 2(\alpha_0 \alpha_1^* + \alpha_0^* \alpha_1) + (\alpha_0 \beta_1^* + \alpha_0^* \beta_1) \}; \\ C &= \frac{3}{4} \{ |\alpha_1|^2 + (\alpha_1 \beta_1^* + \alpha_1^* \beta_1) \}. \end{aligned}$$

Чтобы выразить коэффициенты A , B , C через фазы, воспользуемся тождествами

$$\begin{aligned} |e^{2ix} - 1|^2 &= 4 \sin^2 x; \\ (e^{2ix} - 1)(e^{-2iy} - 1) + (e^{-2ix} - 1)(e^{2iy} - 1) &= \\ &= 4 [\sin^2 x + \sin^2 y - \sin^2(x - y)]. \end{aligned}$$

Тогда:

$$\left. \begin{aligned} A(p^+, p^+) &= \sin^2 \delta_0^{3/2} + \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}); \\ B(p^+, p^+) &= 3 \sin^2 \delta_0^{3/2} + 2 \sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + \sin^2 \delta_{1-}^{3/2} - \\ &\quad - 2 \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}); \\ C(p^+, p^+) &= 3 \{ 2 \sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + \sin^2 \delta_{1-}^{3/2} - \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) \}. \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Указанным способом легко подсчитать коэффициенты A , B , C для реакций (p^-, p^-) и (p^-, n^0) . Приведем лишь окончательные результаты:

$$\begin{aligned} A(p^-, p^-) &= \frac{1}{3} \sin^2 \delta_0^{3/2} + \frac{2}{3} \sin^2 \delta_0^{1/2} - \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_0^{1/2}) + \\ &\quad + \frac{1}{9} \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_{1-}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) + \\ &\quad + \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_{1-}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) + \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) + \\ &\quad + \frac{4}{9} \sin^2 (\delta_{1-}^{1/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B(p^-, p^-) = & \sin^2 \delta_0^{3/2} + 2 \sin^2 \delta_0^{1/2} + \frac{2}{3} \sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + \\
& + \frac{4}{3} \sin^2 \delta_{1+}^{1/2} + \frac{1}{3} \sin^2 \delta_{1-}^{3/2} + \frac{2}{3} \sin^2 \delta_{1-}^{1/2} - \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - \\
& - \frac{4}{9} \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \frac{1}{9} \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \\
& - \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) - \frac{4}{9} \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - \frac{8}{9} \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \\
& - \frac{2}{9} \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{4}{9} \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2}); \\
C(p^-, p^-) = & 2 \sin^2 \delta_{1+}^{3/2} + 4 \sin^2 \delta_{1+}^{1/2} + \sin^2 \delta_{1-}^{3/2} + \\
& + 2 \sin^2 \delta_{1-}^{1/2} - \frac{2}{3} \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \\
& - \frac{1}{3} \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{2}{3} \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) - \\
& - \frac{2}{3} \sin^2 (\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \frac{2}{3} \sin^2 (\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2}); \quad (3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A(p^-, n^0) = & \frac{2}{9} \{ \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_0^{1/2}) + \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) + \\
& + \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) - \\
& - \sin^2 (\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) + \sin^2 (\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2}) + \\
& + \sin^2 (\delta_{1-}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) \};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B(p^-, n^0) = & \frac{2}{9} \{ -2 \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{3/2}) + 2 \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) - \\
& - \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) + \sin^2 (\delta_0^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) + \\
& + 2 \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{3/2}) - 2 \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1+}^{1/2}) + \\
& + \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \sin^2 (\delta_0^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2}) \};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C(p^-, n^0) = & \frac{2}{3} \{ \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1+}^{1/2}) + \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{1/2}) - \\
& - \sin^2 (\delta_{1+}^{3/2} - \delta_{1-}^{3/2}) + \sin^2 (\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{3/2}) - \sin^2 (\delta_{1+}^{1/2} - \delta_{1-}^{1/2}) \}. \quad (4)
\end{aligned}$$

Полученные результаты имеют большое значение при изучении углового распределения рассеяния π -мезонов на протонах. Экспериментально можно проверить формулу (1) и определить коэффициенты A , B , C для реакций (p^+, p^+) ,

(p^-, p^-) , (p^-, n^0) . Тогда шесть неизвестных фаз $\delta_0^{3/2}$, $\delta_0^{1/2}$, $\delta_{1+}^{3/2}$, $\delta_{1-}^{3/2}$, $\delta_{1+}^{1/2}$, $\delta_{1-}^{1/2}$ определяются из девяти уравнений (2), (3), (4), которые оказываются совместными.

Однако вычисленные фазы обладают неоднозначностью двойного рода: во-первых, вследствие того, что в уравнения (2), (3), (4) входят квадраты синусов фаз и разностей фаз, последние определяются с точностью до знака; во-вторых, имеется несколько различных наборов фаз, удовлетворяющих опытному данным. Из них лучше других согласуется с экспериментом решение Ферми, в котором наибольший вклад в рассеяние вносит фаза $\delta_{1+}^{3/2}$, проходящая через 90° при энергии мезона $E \approx 195 \text{ Мэв}$ в лабораторной системе координат, а фазы $\delta_{1-}^{3/2}$, $\delta_{1+}^{1/2}$, $\delta_{1-}^{1/2}$ малы.

Имеется ряд дополнительных критериев, позволяющих устранить указанные неоднозначности. Знаки фаз можно определить из соображений, основывающихся на принципе причинности, а также из опытов, специально учитывающих кулоновское взаимодействие. В выборе правильного решения могли бы помочь опыты по поляризации нуклонов отдачи, но в настоящее время они еще не поставлены. Ожидаемые величины поляризаций для реакций (p^+, p^+) , (p^-, p^-) , (p^-, n^0) определяются в следующей задаче.

27. Рассмотрим подробно реакцию (p^+, p^+) . Пусть спинные функции протона:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{для } s_z = 1/2;$$

$$\beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{для } s_z = -1/2.$$

Если вначале протон имел $s_z = 1/2$, то амплитуда рассеяния запишется в виде

$$f_{1/2} = f_{\alpha\alpha}\alpha + f_{\alpha\beta}\beta \quad (1)$$

и если вначале $s_z = -1/2$, то амплитуда рассеяния

$$f_{-1/2} = f_{\beta\alpha}\alpha + f_{\beta\beta}\beta. \quad (2)$$

Здесь $f_{\alpha\alpha}$, $f_{\beta\beta}$ — амплитуды рассеяния без переориентации спина и $f_{\alpha\beta}$, $f_{\beta\alpha}$ — с переориентацией спина. Амплитуды $f_{\alpha\alpha}$ и $f_{\alpha\beta}$ определяются из формул (5) задачи 23 § 9 как коэффициенты при столбцах $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, причем берутся только S и P -волны

$$f_{\sigma\alpha} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \left\{ \alpha_0 Y_{00} + \frac{1}{\sqrt{3}} [2\alpha_1 + \beta_1] Y_{10} \right\}, \quad (3)$$

$$f_{\sigma\beta} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sqrt{\frac{2}{3}} (\beta_1 - \alpha_1) Y_{11}, \quad (4)$$

где α_0 , α_1 , β_1 даны в задаче 26 § 9. Пользуясь выражениями для функций Паули при $m_j = 1/2$, легко получить:

$$f_{\beta\alpha} = \frac{\sqrt{\pi}}{ik} \sqrt{\frac{2}{3}} (\alpha_1 - \beta_1) Y_{1, -1};$$

$$f_{\beta\beta} = f_{\alpha\alpha}.$$

Если считать, что π -мезоны рассеиваются в плоскости xz , то полярный угол $\varphi = 0$, и следовательно:

$$f_{\alpha\beta} = -f_{\beta\alpha}.$$

Тогда амплитуда рассеяния на протоне с $s_z = -1/2$ (см. (2))

$$f_{-1/2} = -f_{\beta\alpha}\alpha + f_{\alpha\alpha}\beta. \quad (5)$$

Так как вначале протоны не были поляризованы, то из формул (1) и (5) следует, что и после рассеяния они останутся неполяризованными вдоль оси z .

Можно показать, что после рассеяния поляризация протонов в плоскости xz отсутствует. Действительно, спиновые функции протона γ_θ и δ_θ , соответствующие проекциям спина $1/2$ и $-1/2$ на ось z' , проведенную в плоскости xz под углом θ к оси z , имеют вид

$$\begin{pmatrix} \gamma_\theta \\ \delta_\theta \end{pmatrix} = e^{-i\hat{s}_y\theta} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

(см. задачу 19 § 4).

Тогда

$$\begin{aligned}
 f_{1/2} &= f_{\alpha\alpha}\alpha + f_{\alpha\beta}\beta = \\
 &= \left(f_{\alpha\alpha} \cos \frac{\theta}{2} - f_{\alpha\beta} \sin \frac{\theta}{2} \right) \gamma_0 + \left(f_{\alpha\alpha} \sin \frac{\theta}{2} + f_{\alpha\beta} \cos \frac{\theta}{2} \right) \delta_0; \\
 f_{-1/2} &= -f_{\alpha\beta}\alpha + f_{\alpha\alpha}\beta = \\
 &= -\left(f_{\alpha\alpha} \sin \frac{\theta}{2} + f_{\alpha\beta} \cos \frac{\theta}{2} \right) \gamma_0 + \left(f_{\alpha\alpha} \cos \frac{\theta}{2} - f_{\alpha\beta} \sin \frac{\theta}{2} \right) \delta_0,
 \end{aligned}$$

т. е. поляризации в любом направлении в плоскости xz нет.

Однако протоны будут поляризованы вдоль оси y , перпендикулярной плоскости рассеяния. Чтобы найти величину поляризации, выразим $f_{1/2}$ и $f_{-1/2}$ через спиновые собственные функции

$$\gamma = \frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2}}; \quad \delta = \frac{\alpha - i\beta}{\sqrt{2}},$$

соответствующие направлению спина вдоль и против оси y .

Тогда

$$\begin{aligned}
 f_{1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (f_{\alpha\alpha} - if_{\alpha\beta}) \gamma + \frac{1}{\sqrt{2}} (f_{\alpha\alpha} + if_{\alpha\beta}) \delta, \\
 f_{-1/2} &= \frac{-i}{\sqrt{2}} (f_{\alpha\alpha} - if_{\alpha\beta}) \gamma + \frac{i}{\sqrt{2}} (f_{\alpha\alpha} + if_{\alpha\beta}) \delta.
 \end{aligned}$$

Отсюда получаем:

$$W_+ \sim |f_{\alpha\alpha} - if_{\alpha\beta}|^2; \quad W_- \sim |f_{\alpha\alpha} + if_{\alpha\beta}|^2, \quad (6)$$

где W_+ и W_- — вероятности того, что спин после рассеяния будет направлен соответственно параллельно или антипараллельно оси y . Заметим, что формулы (6) справедливы независимо от первоначального значения s_z протона. Подставляя в (6) выражения (3) и (4) для $f_{\alpha\alpha}$ и $f_{\alpha\beta}$, получим:

$$W_{\pm} \sim |\alpha_0 + (2\alpha_1 + \beta_1) \cos \theta \mp i(\beta_1 - \alpha_1) \sin \theta|^2,$$

или

$$\begin{aligned}
 W_{\pm} \sim & \left| \left(e^{2i\delta_0^{3/2}} - 1 \right) + \left(2e^{2i\delta_1^{3/2}} - 3 + e^{2i\delta_1^{3/2}} \right) \cos \theta \pm \right. \\
 & \left. \pm i \left(e^{2i\delta_1^{3/2}} - e^{2i\delta_1^{3/2}} \right) \sin \theta \right|^2.
 \end{aligned}$$

Подобным же образом получим для реакций (p^-, p^-) и (p^-, n^0) :

$$W_{\pm}(p^-, p^-) \sim \left| \left(e^{2i\delta_0^{3/2}} - 3 + 2e^{2i\delta_0^{1/2}} \right) + \right. \\ \left. + \left(2e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - 9 + 4e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} + e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} + 2e^{2i\delta_{1-}^{1/2}} \right) \cos \theta \pm \right. \\ \left. \pm i \left(e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} + 2e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} - 2e^{2i\delta_{1-}^{1/2}} \right) \cos \theta \right|^2;$$

$$W_{\pm}(p^-, n^0) \sim \left| \left(e^{2i\delta_0^{3/2}} - e^{2i\delta_0^{1/2}} \right) + \right. \\ \left. + \left(2e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - 2e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} + e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{1/2}} \right) \cos \theta \pm \right. \\ \left. \pm i \left(e^{2i\delta_{1+}^{3/2}} - e^{2i\delta_{1+}^{1/2}} - e^{2i\delta_{1-}^{3/2}} + e^{2i\delta_{1-}^{1/2}} \right) \sin \theta \right|^2.$$

ПРИЛОЖЕНИЕ I

Ряд задач квантовой механики решается в квазиклассическом приближении. Но квазиклассическое решение справедливо лишь в области, достаточно удаленной от точки поворота, которая определяется условием:

$$V(x) = E.$$

Так как квазиклассика дает решения лишь справа и слева

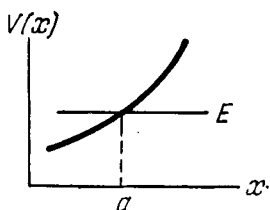


Рис. 32.

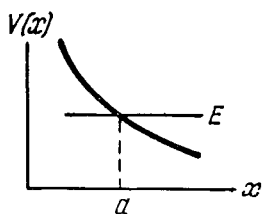


Рис. 33.

от точки поворота, необходимо «сшить» их в этой точке, чтобы получить решение во всем пространстве.

Если потенциальная функция $V(x)$ вблизи точки поворота ведет себя, как показано на рис. 32, сшитое решение имеет вид

$$\psi_1 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right) & \text{для } x < a, \\ \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx} & \text{для } x > a. \end{cases} \quad (1)$$

Для потенциальной функции $V(x)$, показанной на рис. 33,

решением будет

$$\psi_1 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4} \right) & \text{для } x > a, & (1') \\ \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx} & \text{для } x < a & (2') \end{cases}$$

(см. Ландау и Лифшиц, Квантовая механика, Гостехиздат, 1948). Пользуясь этим, найдем такое решение одномерного уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi,$$

которое слева от точки возврата (см. рис. 32) переходит в квазиклассическое решение вида

$$\frac{1}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int_x^a p dx}.$$

Для этого необходимо найти другое решение, линейно независимое по отношению к указанному решению (1), (2). Будем искать его в виде

$$\psi_2 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} \cos \left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right) & \text{для } x < a, & (3) \\ \frac{c}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p| dx} & \text{для } x > a. & (4) \end{cases}$$

Для определения c воспользуемся тем, что для уравнения Шредингера

$$W = \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_1' \\ \psi_2 & \psi_2' \end{vmatrix} = \text{const.}$$

Напишем определитель Вронского для нашего случая,

используя решения (1) и (3)

$$W = \left| \begin{array}{cc} \frac{1}{\sqrt{p}} \sin \left(\frac{1}{h} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right); & -\frac{\sqrt{p}}{h} \cos \left(\frac{1}{h} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right) \\ \frac{1}{\sqrt{p}} \cos \left(\frac{1}{h} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right); & \frac{\sqrt{p}}{h} \sin \left(\frac{1}{h} \int_x^a p dx + \frac{\pi}{4} \right) \end{array} \right| = \frac{1}{h}.$$

(Дифференцирование достаточно производить по аргументам тригонометрических функций, поскольку $\frac{d(n/p)}{dx} \ll 1$.)

Аналогичным образом получим, что в области $x > a$, т. е. для решений (2) и (4), определитель Вронского

$$W = \frac{c}{h}.$$

Из условия $W(x < a) = W(x > a)$ находим, что $c = 1$. Искомое решение получаем как линейную комбинацию функций ψ_1 и ψ_2 :

$$\psi = (\psi_2 \pm i\psi_1) e^{\mp i \frac{\pi}{4}}.$$

Окончательно имеем:

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\pm \frac{i}{h} \int_x^a p dx} & \text{для } x < a, \\ \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{h} \int_a^x |p| dx \mp i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{h} \int_a^x |p| dx \pm i \frac{\pi}{4}} & \text{для } x > a. \end{cases}$$

Теперь найдем такое решение одномерного уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi,$$

которое слева от точки возврата (см. рис. 33) переходит в квазиклассическое решение вида

$$\frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx}.$$

Для этого мы воспользуемся полученным выше результатом. Именно, искомое решение представляет собой линейную комбинацию решений ψ'_1 и ψ'_2 предыдущего случая, где

$$\psi'_1 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx} & \text{для } x > a, \\ \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx - i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx + i \frac{\pi}{4}} & \text{для } x < a, \end{cases}$$

$$\psi'_2 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx} & \text{для } x > a, \\ \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx + i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{2\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx - i \frac{\pi}{4}} & \text{для } x < a. \end{cases}$$

Получим:

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^a |p| dx} & \text{для } x < a, \\ \frac{1}{2\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx + i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{2\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx - i \frac{\pi}{4}} & \text{для } x > a, \end{cases}$$

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^a |p| dx} & \text{для } x < a, \\ \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx - i \frac{\pi}{4}} + \frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx + i \frac{\pi}{4}} & \text{для } x > a. \end{cases}$$

ПРИЛОЖЕНИЕ II

Целый ряд опытных данных (например, рассеяние π -мезонов на протонах и нейтронах) свидетельствуют о том, что протон и нейтрон могут взаимно превращаться друг в друга. Это дает нам основание рассматривать протон и нейтрон как одну частицу — нуклон, которая может находиться в двух состояниях: или в протонном, или в нейтронном. Эти состояния различаются значением зарядовой переменной: у протона заряд в единицах e равен 1 и у нейтрона — 0. Тогда нуклон можно описывать волновой функцией, состоящей из двух компонент, в соответствии с двумя значениями зарядовой переменной. Эту функцию мы запишем как

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_p \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$

Учитывая условие нормировки $|\psi_p|^2 + |\psi_n|^2 = 1$, мы возьмем:

$$\psi_p = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \psi_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Введем операторы, действующие на эти двухкомпонентные функции:

$$\tau_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \tau_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Легко проверить, что

$$\begin{aligned} \tau_+ \psi_p &= 0, & \tau_- \psi_p &= \psi_n, \\ \tau_+ \psi_n &= \psi_p, & \tau_- \psi_n &= 0. \end{aligned}$$

Из этих соотношений следует, что τ_+ есть оператор возникновения заряда, т. е. он переводит нуклон из нейтронного состояния в протонное, и τ_- есть оператор исчезновения заряда.

Далее введем операторы:

$$\tau_x = \frac{1}{2} (\tau_+ + \tau_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\tau_y = -\frac{i}{2} (\tau_+ - \tau_-) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\tau_z = \frac{1}{2} (\tau_+ \tau_- - \tau_- \tau_+) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Эти операторы тождественны с известными из теории спина матрицами Паули и, следовательно, обладают такими же формальными свойствами, что и последние. По аналогии с теорией спина мы будем считать, что τ_x , τ_y , τ_z суть операторы компонент вектора τ в некотором трехмерном пространстве.

Это пространство называется изотопическим пространством, а вектор τ — вектором изотопического спина нуклона. Следует заметить, что понятие изотопического пространства является вспомогательным, и оно не имеет непосредственного физического смысла. Абсолютное значение вектора τ равно $1/2$, и два зарядовых состояния нуклона можно рассматривать как состояния с разными значениями проекции изотопического спина на ось z в изотопическом пространстве. При $\tau_z = 1/2$ имеем протон, при $\tau_z = -1/2$ нейтрон. Заметим, что так как изотопическое пространство и изотопический спин носят формальный характер, то непосредственный физический смысл имеет не оператор τ_z , а так называемый оператор заряда:

$$q = \tau_z + \frac{1}{2} I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

π^{+-} , π^0 -, π^- -мезоны можно также рассматривать как одну частицу, которая может существовать в трех зарядовых состояниях, соответствующих значениям зарядовой переменной: 1, 0, —1. Волновая функция π -мезона будет, очевидно, трехкомпонентной в соответствии с тремя возможными

зарядовыми состояниями

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_+ \\ \varphi_0 \\ \varphi_- \end{pmatrix}.$$

Учитывая условие нормировки, мы возьмем:

$$\varphi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Можно ввести операторы возникновения и исчезновения заряда π -мезона

$$T_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

которые удовлетворяют соотношениям:

$$\begin{aligned} T_+\varphi_+ &= 0; & T_+\varphi_0 &= \varphi_+; & T_+\varphi_- &= \varphi_0; \\ T_-\varphi_+ &= \varphi_0; & T_-\varphi_0 &= \varphi_-; & T_-\varphi_- &= 0. \end{aligned}$$

Перейдем к операторам:

$$\begin{aligned} T_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(T_+ + T_-) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ T_y &= \frac{i}{\sqrt{2}}(T_+ - T_-) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ T_z &= T_+T_- - T_-T_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

которые являются операторами компонент вектора изотопического спина \mathbf{T} в изотопическом пространстве. Абсолютно

значение T равно 1. Различные зарядовые состояния будут состояниями с различными значениями проекции изотопического спина на ось z в изотопическом пространстве. Заметим, что для π -мезона оператор заряда Q совпадает с оператором T_z

$$Q = T_z.$$

Рассмотрим теперь изотопические свойства системы нуклон—мезон. Эту систему мы будем характеризовать полным изотопическим моментом I

$$I = \tau + T$$

и его проекцией I_z на ось z .

Имеющиеся сейчас опытные данные позволяют предполагать, что для системы мезон—нуклон справедлива гипотеза изотопической инвариантности (зарядовой независимости), т. е. гипотеза о независимости свойств системы от полного заряда системы, если роль кулоновских сил мала. Математически это требование можно выразить как инвариантность гамильтониана взаимодействия относительно вращений в трехмерном изотопическом пространстве. Отсюда непосредственно следует, что полный изотопический момент I и его проекция I_z на ось z в системе мезон—нуклон сохраняются.

