



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА



teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

ЧАСТЬ 2

СИЛАЕВ
ПЕТР КОНСТАНТИНОВИЧ
—
ФИЗФАК МГУ

КОНСПЕКТ ПОДГОТОВЛЕН
СТУДЕНТАМИ, НЕ ПРОХОДИЛ
ПРОФ. РЕДАКТУРУ И МОЖЕТ
СОДЕРЖАТЬ ОШИБКИ.
СЛЕДИТЕ ЗА ОБНОВЛЕНИЯМИ
НА VK.COM/TEACHINMSU.

ЕСЛИ ВЫ ОБНАРУЖИЛИ
ОШИБКИ ИЛИ ОПЕЧАТКИ,
ТО СООБЩИТЕ ОБ ЭТОМ,
НАПИСАВ СООБЩЕСТВУ
VK.COM/TEACHINMSU.



БЛАГОДАРИМ ЗА ПОДГОТОВКУ КОНСПЕКТА
СТУДЕНТА ФИЗИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ
КАМИНСКОГО АЛЕКСЕЯ

Содержание

Лекция 1	7
Стационарная теория возмущений	7
Вывод стационарной теории возмущений для невырожденных уровней	9
Физический смысл φ	11
Теория возмущений второго порядка для невырожденных уровней	12
Функция Грина в теории возмущений	13
Лекция 2	14
Функция Грина в теории возмущений	14
Для невырожденных уровней	14
Теория возмущений для вырожденных уровней	16
Теория возмущений для близких уровней	18
Тождественные частицы	19
Лекция 3	21
Системы тождественных частиц	21
Базис в пространстве состояний тождественных частиц	22
Тождественные фермионы	22
Тождественные бозоны	23
Наблюдаемые в пространстве состояний тождественных частиц	24
Многоэлектронный атом	25
Приближение центрально-симметричного самосогласованного поля (центрального поля)	26
Методы нахождения центрально-симметричного самосогласованного потенциала	27
Лекция 4	29
Приближение центрального поля	29
1-е правило Хунда	31
2-е правило Хунда	31
Диаграмма Юнга	32
Спиновая диаграмма Юнга	32
Координатная диаграмма Юнга	33
Явный вид волновых функций термов	36
Лекция 5	38
Явный вид волновых функций терма	38
Правила Хунда (объяснение)	41
1-е правило Хунда	41
Обменное взаимодействие	44
Неправильное доказательство 1-го правила Хунда	44

Лекция 6	46
Правила Хунда (объяснение)	46
1-е правило Хунда	46
2-е правило Хунда	46
Тонкая структура термов	47
3-е правило Хунда	52
Лекция 7	53
Тонкая структура термов	53
3-е правило Хунда	53
Многоэлектронный атом в слабых полях	54
Лёгкий атом в магнитном поле	54
Лёгкий атом в электрическом поле	58
Лекция 8	61
Многоэлектронный атом в слабых полях	61
Лёгкий атом в электрическом поле	61
Метод Хартри и метод Хартри-Фока	62
Метод Хартри	62
Метод Хартри-Фока	64
Таблица Менделеева	65
Молекулы	66
Ион водорода	66
Молекула водорода	69
Лекция 9	70
Упругое потенциальное рассеяние	70
Уравнение Липпмана-Швингера	74
Борновский ряд	76
Лекция 10	79
Борновский ряд	79
Парциальное разложение	79
Условие унитарности для парциальных амплитуд рассеяния	84
Рецепт решения задач	84
Формулы парциального рассеяния в терминах фазы рассеяния	84
Метастабильные уровни и их резонансы в рассеянии	85
Лекция 11	86
Метастабильные уровни и их резонансы в рассеянии	86
Метастабильные уровни	88
Динамическая картина	96
Лекция 12	97
Теория рассеяния для низких и высоких энергий	97
Теория рассеяния для низких энергий	97

Теория рассеяния при высоких энергиях (приближение эйконала)	101
Лекция 13	106
Рассеяние при высоких энергиях	106
Теория переходов	108
Представление Дирака (Представление взаимодействия)	108
Нестационарная теория возмущений (НТВ)	110
Адиабатические переходы (АП)	112
Лекция 14	114
Теория переходов	114
Адиабатические переходы (АП)	114
Мгновенные переходы (МП)	115
Переходы под действием периодического возмущения (ПВ)	115
Случай, когда $V_{nn}(t) \neq 0$	119
Функция Грина и эволюция системы	120
Лекция 15	122
Теория переходов	122
Функция Грина и эволюция системы	122
Лекция 16	129
Теория переходов	129
Функция Грина и эволюция системы	129
s -матрица	130
Оптическая теорема в теории переходов	134
Лекция 17	136
Теория переходов	136
Оптическая теорема в теории переходов	136
Вторичное квантование	137
Аксиоматический способ построения	137
Различие бозонов и фермионов во вторичном квантовании	139
Введение оператора числа частиц	142
Лекция 18	144
Вторичное квантование	144
Квантование электромагнитного поля	146
Лекция 19	151
Квантование электромагнитного поля	151
Задача излучения	155
Лекция 20	157
Квантование электромагнитного поля	157
Задача излучения	157
Квантовые флуктуации. Нулевой шум	160

Лекция 21	162
Частица Дирака	162
Свободная частица Дирака	163
Скорость частицы Дирака	167
Лекция 22	169
Частица Дирака	169
Скорость частицы Дирака	169
Нерелятивистский предел для уравнения Дирака	170
Невозможность локализации частицы Дирака	173

Лекция 1

Стационарная теория возмущений

Пусть имеется гамильтониан следующего вида:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I, \quad (1.1)$$

где \hat{H}_0 - гамильтониан, для которого известно решение (пусть даже и приближённое), то есть известны его уровни энергии и собственные волновые функции, а \hat{H}_I - малое возмущение.

Неправильно писать условие применения теории возмущения следующим образом:

$$\cancel{\hat{H}_I} \ll \hat{H}_0 \quad (1.2)$$

Часто гамильтониан (1.1) пишут в виде $\hat{H}_0 + \epsilon \hat{H}_I$, где $\epsilon \ll 1$, но это «не спасает», так как не исключает выхода за рамки теории возмущений. Но с помощью ϵ можно нагляднее видеть порядок малости, например, член $\epsilon^2 E_n^{(2)} |\psi_n^{(1)}\rangle \epsilon^1$ - 3-го порядка малости.

Ряды теории возмущений могут как сходиться, так и расходиться, но это не влияет на практическое применение теории возмущений.

Пример

Пусть имеется функция:

$$f(x) = \int_0^\infty dt \frac{x e^{-t}}{1 + tx} \quad (1.3)$$

при $x > 0$. График функции (См. рис. 1.1).

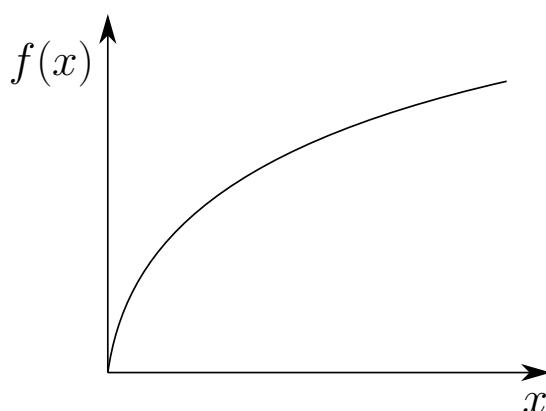


Рис. 1.1. График функции $f(x)$

Разложим $f(x)$ по степеням x :

$$f(x) = \int_0^\infty dt \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n x^{n+1} t^n e^{-t} \quad (1.4)$$

Поменяв местами суммирование и интегрирование, а также взяв интегралы в слагаемых суммы, получим

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n x^{n+1} n! = x - x^2 + 2x^3 - 6x^4 + \dots \quad (1.5)$$

При фиксированном x зависимость $n!x^{n+1}$ от n будет иметь минимум (См. рис. 1.2) $n_0 \sim \frac{1}{x}$, то есть чем меньше x , тем дальше члены ряда (1.5) убывают.

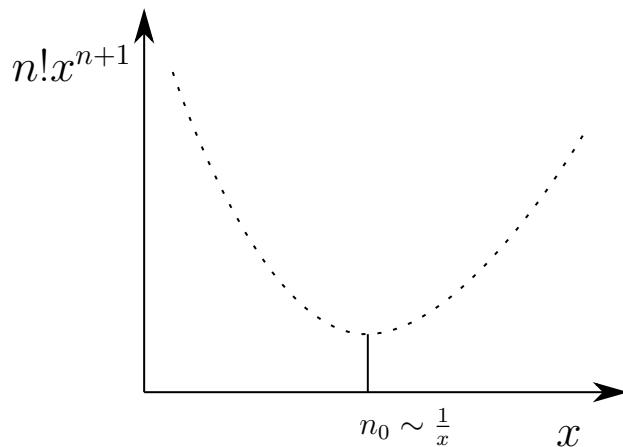


Рис. 1.2. Зависимость $n!x^{n+1}$ от n

Пусть δ_N — ошибка (разница между рядом (1.5) и функцией (1.3)), то есть

$$\delta_N = f(x) - \sum_{n=0}^N (-1)^n x^{n+1} n! \quad (1.6)$$

При большем x минимум ошибки происходит при меньшем n (См. рис. 1.3). В ми-

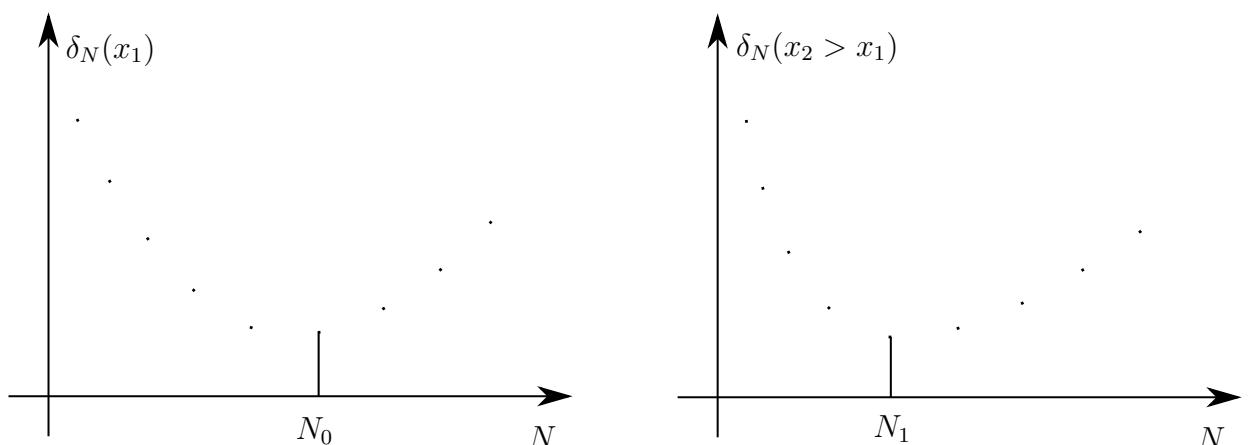


Рис. 1.3. Ошибка при разных x

нимуме ошибка может быть достаточно малой, чтобы приближать точное решение,

несмотря на то, что сам ряд расходится. Таким образом, теорией возмущений можно пользоваться даже, если ряд теории возмущений расходится, но чем больше порядок, тем меньшую область он может достаточно точно приближать (См. рис. 1.4).

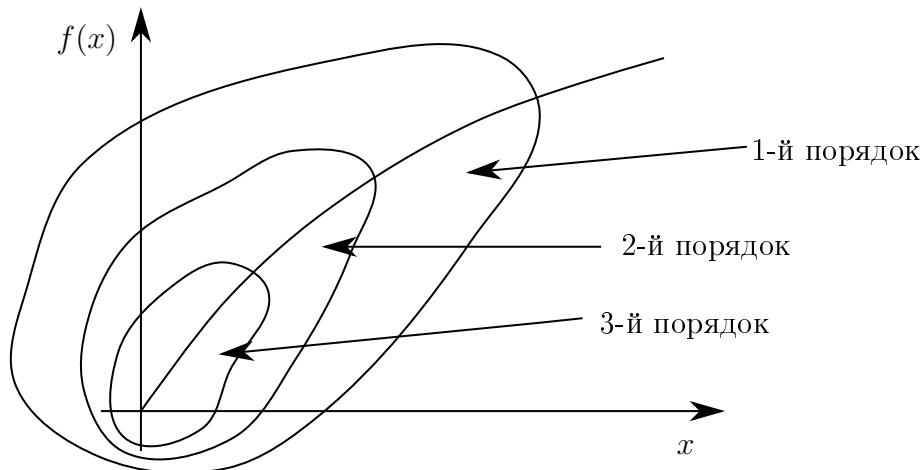


Рис. 1.4. Область применения теории возмущений в зависимости от её порядка

Дальше третьего порядка обычно не доходят, так как в (1.1) \hat{H}_I - уже приближение. \hat{H}_{II} может быть в первом порядке теории возмущений больше, чем третий порядок теории возмущений у \hat{H}_I . Тогда используют многослойную теорию возмущений, представляя вместо \hat{H}_0 и \hat{H}_I - $\hat{\tilde{H}}_0$ и $\hat{\tilde{H}}_I$:

$$\underbrace{\hat{H}_0 + \hat{H}_I}_{\hat{\tilde{H}}_0} + \underbrace{\hat{H}_{II}}_{\hat{\tilde{H}}_I} \quad (1.7)$$

Вывод стационарной теории возмущений для невырожденных уровней

Пусть в (1.1), имеется гамильтониан \hat{H}_0 :

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle, \quad (1.8)$$

в котором для каждого уровня энергии $E_n^{(0)}$ существует единственная волновая функция $|\psi_n^{(0)}\rangle$, которая удовлетворяет уравнению (1.8). Тогда (1.8) - нулевое приближение решения (1.1). С учётом поправок, уровни энергии и волновые функции (1.1) будут иметь вид:

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots \quad (1.9)$$

$$|\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle + |\psi_n^{(2)}\rangle + \dots \quad (1.10)$$

Ограничившись первым порядком малости, подставим (1.9), (1.10) в (1.1), полу-

чим

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \widehat{H}_0 \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \widehat{H}_I \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \widehat{H}_I \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle &= \\ = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle &\quad \text{2-й пор. мал.} \end{aligned} \quad (1.11)$$

Для удобства будем рассматривать пространство решений (1.11) в базисе собственных функций \widehat{H}_0 .

Тогда имеются следующие правила:

- 1) Домножив (1.11) слева на $\langle \psi_n^{(0)} |$ и сократив одинаковые слагаемые, получится выражение для поправки к уровню энергии
- 2) Домножив (1.11) слева на $\langle \psi_m^{(0)} |$, где $m \neq n$ - получится поправка к волновой функции

Убедимся в этом на примере поправок первого порядка малости. Так как \widehat{H}_0 - эрмитов оператор, то

$$\langle \psi_n^{(0)} | \widehat{H}_0 = \langle \psi_n^{(0)} | E_n^{(0)} \quad (1.12)$$

Домножим (1.11) слева на $\langle \psi_n^{(0)} |$ с учётом (1.12), получим

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^{(0)} | E_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | \widehat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle &= \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | E_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{=1} + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=1} \Rightarrow \\ \Rightarrow E_n^{(1)} &= \langle \psi_n^{(0)} | \widehat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (1.13)$$

Таким образом, первая поправка к энергии в состоянии $|\psi_n\rangle$ есть среднее значение оператора \widehat{H}_I в состоянии $|\psi_n^{(0)}\rangle$.

Найдём поправку к волновой функции. Домножим (1.11) слева на $\langle \psi_m^{(0)} |$, где $m \neq n$. С учётом (1.12) получим, учитывая только первый порядок малости

$$\begin{aligned} \langle \psi_m^{(0)} | E_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_m^{(0)} | \widehat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle &= \\ = \langle \psi_m^{(0)} | E_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + E_n^{(1)} \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle &\xrightarrow{0} \\ \Rightarrow c_m^{(1)} \equiv \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle &= \frac{1}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} \langle \psi_m^{(0)} | \widehat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

Таким образом, мы получили коэффициенты разложения $|\psi_n^{(1)}\rangle$ по функциям $|\psi_m^{(0)}\rangle$. То есть, теперь известны все $c_m^{(1)}$, кроме того $c_m^{(1)}$, где $m = n$. Будем писать это слагаемое отдельно.

Отсюда легко получить 1-е условие применимости теории возмущений. Имеем

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_k c_k^{(1)} |\psi_k^{(0)}\rangle = c_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} c_m^{(1)} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (1.15)$$

Поскольку $|\psi_n^{(1)}\rangle$ - малая поправка к $|\psi_n^{(0)}\rangle$, то из (1.15) очевидно, что теория возмущений имеет смысл только тогда, когда коэффициенты $c_m^{(1)}$ много меньше единицы:

$$|c_m^{(1)}| = \left| \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \right| \ll 1 \Rightarrow \left| \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle \right| \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}| \quad (1.16)$$

Неизвестный коэффициент $c_n^{(1)}$ можно получить из условия нормировки волновой функции:

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=1} + \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{=c_n^{(1)}} + \underbrace{\langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=c_n^{*(1)}} + \underbrace{\langle \psi_n^{(1)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{\text{2-й пор. мал.}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow 0 = c_n^{(1)} + c_n^{*(1)} = \operatorname{Re} \{c_n^{(1)}\} \Rightarrow c_n^{(1)} = i\varphi, \quad (1.17) \end{aligned}$$

где $|\varphi| \ll 1$.

Физический смысл φ

Распишем полученную волновую функцию $|\psi_n\rangle$. С учётом (1.10), (1.15), (1.17) получим

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle &= |\psi_n^{(0)}\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + i\varphi |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} c_m^{(1)} |\psi_m^{(0)}\rangle = \\ &= e^{i\varphi} |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{m \neq n} c_m^{(1)} |\psi_m^{(0)}\rangle \quad (1.18) \end{aligned}$$

Таким образом, φ имеет смысл фазового сдвига волновой функции; так как это не наблюдаемая величина, то физически содержательная часть поправки волновой функции в первом порядке находится в слагаемых с коэффициентами $c_m^{(1)}$, где $m \neq n$, а сам φ физического смысла не имеет, и $c_n^{(1)}$ можно выбирать произвольным.

Поэтому, далее везде, кроме заранее оговоренных случаев, будет подразумеваться, что:

$$c_n^{(1)} \equiv 0 \quad (1.19)$$

Формально, других условий применимости теории возмущения в первом порядке нет. Но наложим ещё одно условие, смысл которого будет ясен после рассмотрения последующих порядков теории возмущений. Оно имеет следующий вид:

$$|E_n^{(1)}| \ll |E_n^{(0)} - E_{n\pm 1}^{(0)}| \quad (1.20)$$

Несмотря на то, что это условие на данном этапе введено по большей части эстетически, но смысл его может быть понятен из того, что поправка к уровню энергии должна быть малой по сравнению с разницей между основными уровнями, чтобы n -й основной уровень с малой поправкой не стал выше, чем $(n+1)$ -й (См. рис. 1.5).

..... n

.....

Рис. 1.5. Смысл второго условия применимости теории возмущений

Теория возмущений второго порядка для невырожденных уровней

Рассмотрим в стационарном уравнении Шрёдингера слагаемые второго порядка малости:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(2)}\rangle + \hat{H}_I |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(2)}\rangle + E_n^{(1)} |\psi_n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (1.21)$$

Домножим (1.21) слева на $\langle \psi_n^{(0)} |$, тогда, учитывая (1.12), получим

$$\begin{aligned} \cancel{\langle \psi_n^{(0)} | E_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle} + \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(1)} \rangle &= \\ &= \cancel{\langle \psi_n^{(0)} | E_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle} + E_n^{(2)} \underbrace{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}_{=1} + E_n^{(1)} \cancel{\langle \psi_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle} \xrightarrow{0, \varphi = 0} \\ &\Rightarrow E_n^{(2)} = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(1)} \rangle \quad (1.22) \end{aligned}$$

Подставив (1.15) с учётом (1.14) и (1.19) в (1.22), получим

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(1)} \rangle = \\ &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I \sum_{m \neq n} |\psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_m^{(0)} \rangle \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (1.23) \end{aligned}$$

Из (1.23) видно, что если n - основное состояние, то $E_n^{(2)} < 0$.

Найдём поправку для волновой функции. Домножим (1.21) слева на $\langle \psi_m^{(0)} |$, где $m \neq n$. Учитывая (1.12), получим

$$\begin{aligned} \langle \psi_m^{(0)} | E_m^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle + \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(1)} \rangle &= \langle \psi_m^{(0)} | E_n^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle + E_n^{(1)} \underbrace{\langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}_{c_m^{(1)}} + \\ &+ E_n^{(2)} \cancel{\langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle} \xrightarrow{0} c_m^{(2)} = \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(2)} \rangle = \\ &= \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \left[\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} c_m^{(1)} \right] \quad (1.24) \end{aligned}$$

Из (1.24) становится понятно второе условие применимости теории возмущений (1.20). Поскольку $|\psi_m^{(2)}\rangle$ - малая поправка к волновой функции, то $c_m^{(2)} \ll 1$. Тогда из (1.24) вытекает условие (1.20).

Функция Грина в теории возмущений

Пусть имеется решение уравнения

$$\hat{L}_0 |\psi^{(0)}\rangle = 0 \quad (1.25)$$

Пусть оператор \hat{L}_0 испытал некоторое возмущение $\delta\hat{L}$. Нужно найти решение для оператора $(\hat{L}_0 - \delta\hat{L})$:

$$(\hat{L}_0 - \delta\hat{L}) |\psi\rangle = 0 \quad (1.26)$$

Из (1.25) и (1.26) имеем

$$(\hat{L}_0 - \delta\hat{L}) |\psi\rangle = 0 = \hat{L}_0 |\psi\rangle \quad (1.27)$$

Пусть известен обратный к \hat{L}_0 оператор:

$$\hat{G}_0 = \hat{L}_0^{-1} \quad (1.28)$$

Тогда, домножив (1.27) слева на (1.28), получим

$$\hat{G}_0 \hat{L}_0 \overset{1}{\overrightarrow{|\psi\rangle}} - \hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi\rangle = \hat{G}_0 \hat{L}_0 \overset{1}{\overrightarrow{|\psi^{(0)}\rangle}} \Rightarrow |\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi\rangle \quad (1.29)$$

Выражение (1.29) представляет собой общий вид теории возмущений. Если $\hat{G}_0 \delta\hat{L}$ - маленькая, то $|\psi^{(0)}\rangle$ - основная часть $|\psi\rangle$. Тогда $|\psi^{(0)}\rangle$ можно использовать как нулевое приближение для $|\psi\rangle$. Чтобы получить следующие приближения, нужно рекурсивно в правую часть последнего неравенства в (1.29) вместо $|\psi\rangle$ вставить предыдущее приближение, проделав это, получим

$$|\psi\rangle = \underbrace{|\psi^{(0)}\rangle}_{0\text{-е приб.}} + \underbrace{\hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi^{(0)}\rangle}_{1\text{-е приб.}} + \underbrace{\hat{G}_0 \delta\hat{L} \hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi^{(0)}\rangle}_{2\text{-е приб.}} + \dots \quad (1.30)$$

Выражение (1.30) как правило называют Борновским рядом.

Лекция 2

Функция Грина в теории возмущений

Для невырожденных уровней

Итак, известно решение уравнения

$$\hat{L}_0 |\psi^{(0)}\rangle = 0, \quad (2.1)$$

а $\delta\hat{L}$ - маленькая поправка к оператору \hat{L}_0 , а $\hat{L}_0^{-1} = \hat{G}_0$ - обратный оператор. Тогда

$$\begin{aligned} (\hat{L}_0 - \delta\hat{L}) |\psi\rangle &= 0 = \hat{L}_0 |\psi^{(0)}\rangle \Rightarrow \cancel{\hat{G}_0 \hat{L}_0}^1 |\psi\rangle - \hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi\rangle = \cancel{\hat{G}_0 \hat{L}_0}^1 |\psi^{(0)}\rangle \Rightarrow \\ &\Rightarrow |\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + \hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi\rangle \Rightarrow |\psi\rangle = \underbrace{|\psi^{(0)}\rangle}_{\text{1-е приб.}} + \underbrace{\hat{G}_0 \delta\hat{L} |\psi^{(0)}\rangle}_{\text{2-е приб.}} + \dots \end{aligned} \quad (2.2)$$

Применим это к уравнению Шрёдингера. Известно решение уравнения:

$$\hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (2.3)$$

Требуется решить уравнение:

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_I) |\psi_n\rangle = (E_n^{(0)} + \delta E) |\psi_n\rangle, \quad (2.4)$$

где

$$\delta E = \delta E^{(1)} + \delta E^{(2)} + \dots \quad (2.5)$$

Найдём в (2.4) явный вид оператора \hat{L}_0 . Для этого перенесём \hat{H}_0 вправо, а δE - влево, тогда:

$$\underbrace{(E_n^{(0)} - \hat{H}_0)}_{\hat{L}_0} |\psi_n\rangle = \underbrace{(\hat{H}_I - \delta E)}_{\delta\hat{L}} |\psi_n\rangle \quad (2.6)$$

Тогда функция Грина для стационарного уравнения Шрёдингера будет иметь вид

$$\hat{G}_0(E) \equiv \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm \underbrace{i\epsilon}_{\text{полюса}}}, \quad (2.7)$$

где $\epsilon \rightarrow 0$. « \pm » в знаменателе соответствуют правильной и инверсной эволюции во времени. Раскрывая (2.7) по определению функции от оператора, получим

$$\hat{G}_0(E) \equiv \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} = \sum_k \frac{|\psi_k^{(0)}\rangle \langle \psi_k^{(0)}|}{E - E_k + i\epsilon} \quad (2.8)$$

Полюса функции Грина - дискретный спектр задачи. Вычислим следующее выражение

$$\hat{G}_0(E_n^{(0)}) = \frac{|\psi_n^{(0)}\rangle \langle \psi_n^{(0)}|}{i\epsilon} + \underbrace{\sum_{m \neq n} \frac{|\psi_m^{(0)}\rangle \langle \psi_m^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}_{\equiv \widehat{\tilde{G}}_0(E_n^{(0)})}, \quad (2.9)$$

где введено обозначение

$$\widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) \equiv \sum_{m \neq n} \frac{|m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (2.10)$$

Заметим, что

$$\widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) |\psi_n^{(0)}\rangle = 0 \quad (2.11)$$

Тогда ряд теории возмущений будет иметь вид (ограничимся первым приближением)

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \underbrace{|n^{(0)}\rangle}_{0\text{-е приб.}} + \underbrace{\widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) (\widehat{H}_I - \delta E^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle}_{1\text{-е приб.}} + \dots = \\ &= |n^{(0)}\rangle + \underbrace{\frac{|n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|}{i\epsilon} \cdot (\widehat{H}_I - \delta E^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle +}_{+ \widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) (\widehat{H}_I - \delta E^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle + \dots} \quad (2.12) \end{aligned}$$

Так как $\epsilon \rightarrow 0$, то подчёркнутое слагаемое в (2.12) должно быть нулевым, откуда

$$\langle \psi_n^{(0)} | \widehat{H}_I - \delta E^{(1)} | n^{(0)} \rangle = 0 \Rightarrow \delta E^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | \widehat{H}_I | n^{(0)} \rangle \quad (2.13)$$

Тогда учитывая (2.11) и (2.13), (2.12) примет вид

$$|\psi\rangle = |n^{(0)}\rangle + 0 + \widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) (\widehat{H}_I - \delta E^{(1)}) |\psi_n^{(0)}\rangle \quad (2.14)$$

Таким образом, учитывая (2.10) и сравнивая с (1.14), имеем

$$\begin{aligned} |n^{(1)}\rangle &= \widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) \widehat{H}_I |n^{(0)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \langle \psi_m^{(0)} | \widehat{H}_I | n^{(0)} \rangle \cdot \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \\ &= \sum_{m \neq n} c_m^{(1)} |m^{(0)}\rangle \quad (2.15) \end{aligned}$$

Во втором порядке теории появятся выражения

$$\begin{aligned} &\widehat{\tilde{G}_0}(E_n^{(0)}) (-\delta E^{(2)}) |\psi_n^{(0)}\rangle \\ &\widehat{\tilde{G}_0}(E_m^{(0)}) (\widehat{H}_I - \delta E^{(1)}) |\psi_n^{(1)}\rangle \end{aligned}$$

которые имеют в себе поправки к энергии.

Вспомним, что для невырожденных уровней поправка к энергии второго порядка:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_m^{(0)} \rangle \cdot \frac{1}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle = \\ &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I \sum_{m \neq n} \frac{|\psi_m^{(0)}\rangle \langle \psi_m^{(0)}|}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \cdot \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle = \\ &= \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I \underbrace{\widehat{G}_0(E_n^{(0)})}_{|\psi_n^{(1)}\rangle} \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle = \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(1)} \rangle \quad (2.16) \end{aligned}$$

Допустим, что

$$\langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle = 0 \quad (2.17)$$

Тогда второй порядок есть среднее от

$$\hat{H}_I \widehat{G}_0(E_n^{(0)}) \hat{H}_I \quad (2.18)$$

Теория возмущений для вырожденных уровней

Пусть имеется n -ый K -кратно вырожденный уровень. То есть уровню энергии $E_n^{(0)}$ соответствуют K различных волновых функций (См. рис. 2.1).

$$\frac{E_n^{(0)}}{K}$$

Рис. 2.1. Вырожденный уровень с кратностью K

Такие чистые состояния с энергией $E_n^{(0)}$ мы будем обозначать, как

$$|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle, \quad (2.19)$$

где $\alpha = 1, \dots, K$. Тогда любая комбинация (2.19) будет иметь энергию $E_n^{(0)}$. Тогда какое-либо произвольное состояние с такой энергией будем обозначать, как

$$\sum_{\alpha=1}^K c_{\alpha} |\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle \quad (2.20)$$

Условие нормировки для c_{α} примет вид

$$\sum_{\alpha=1}^K |c_{\alpha}|^2 = 1 \quad (2.21)$$

Выведем условия построения ряда теории возмущений для c_{α} . Пусть

$$|\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_{\alpha=1}^K c_{\alpha} |\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle \quad (2.22)$$

Из уравнения Шрёдингера, учитывая слагаемые первого порядка, получим

$$\hat{H}_I |\psi_n^{(0)}\rangle + \hat{H}_0 |\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)} |\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} |\psi_n^{(1)}\rangle \quad (2.23)$$

Нужно рассмотреть K уравнений для одного уровня энергии, и остальные уравнения с $m \neq n$. Домножение (2.23) слева на $\langle \psi_m^{(0)} |$, где $m \neq n$ ничего нового не даёт.

Домножим (2.23) слева на $\langle \psi_{n\beta}^{(0)} |$, где $\beta = 1, \dots, K$. Получим

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_n^{(0)} \rangle + \cancel{\langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \hat{H}_0 | \psi_n^{(1)} \rangle} &= \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | E_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle + \cancel{\langle \psi_{n\beta}^{(0)} | E_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle} \Rightarrow \\ \Rightarrow \sum_{\alpha=1}^K \underbrace{\langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_{n\alpha}^{(0)} \rangle}_{H_{\beta\alpha}^{(1)}} \cdot c_{\alpha} &= E_n^{(1)} \sum_{\alpha=1}^K \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \psi_{n\alpha}^{(0)} \rangle \cdot c_{\alpha} = E_n^{(1)} c_{\beta} = \\ &= \sum_{\alpha=1}^K H_{\beta\alpha}^{(1)} c_{\alpha} = E_n^{(1)} c_{\beta} \quad (2.24) \end{aligned}$$

Уравнение (2.24) называется секулярным.

Таким образом, имеем собственные значения $\lambda^{[1]}$ и соответствующие им константы $c_{\alpha}^{[1]}$, которые являются поправками к уровню энергии и разложением волновых функций соответственно (См. рис. 2.2).

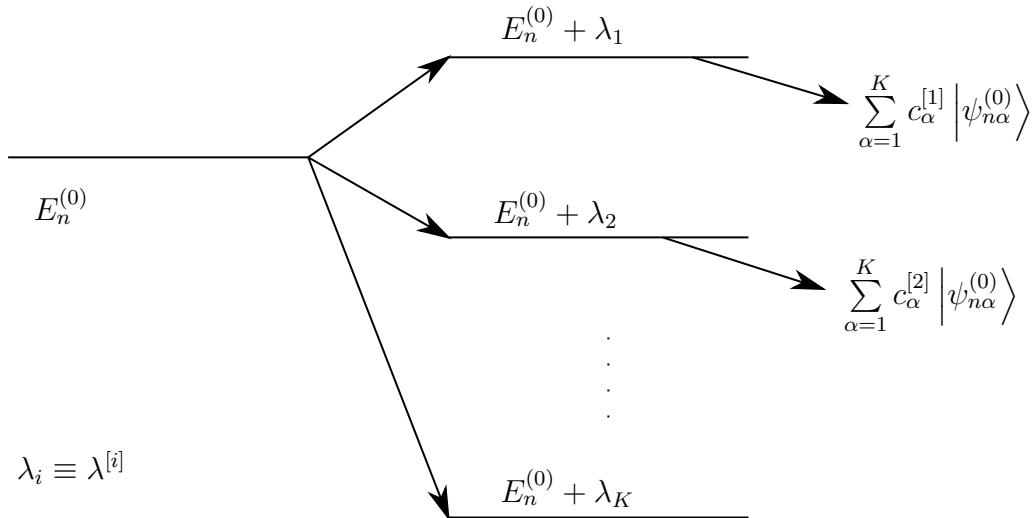


Рис. 2.2. Снятие вырождения уровня в первом порядке теории возмущений

Если окажется, что $H_{\beta\alpha}^{(1)} \equiv 0$, то нужно искать собственные вектора матрицы

$$H_{\beta\alpha}^{(2)} = \langle \psi_{n\beta}^{(0)} | \hat{H}_I \widehat{\tilde{G}_0} (E_n^{(0)}) \hat{H}_I | \psi_{n\alpha}^{(0)} \rangle \quad (2.25)$$

В самом деле, так как

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \widehat{\tilde{G}_0} (E_n^{(0)}) \hat{H}_I |\psi_n^{(0)}\rangle, \quad (2.26)$$

где $\left| \psi_n^{(0)} \right\rangle$ - линейная комбинация (2.22) с коэффициентами α , заметим, что

$$H_{\beta\alpha}^{(1)} \equiv 0 \quad (2.27)$$

тогда собственные значения матрицы $H_{\beta\alpha}^{(1)}$ равны нулю, тогда из стационарного уравнения Шрёдингера, учитывая только члены второго порядка, получим (отмеченное слагаемое уничтожится при следующем домножении)

$$\widehat{H}_0 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \widehat{H}_I \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \cancel{E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle} \quad (2.28)$$

умножая (2.28) слева на $\left\langle \psi_{n\beta}^{(0)} \right|$, получим

$$\left\langle \psi_{n\beta}^{(0)} \right| \widehat{H}_I \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = E_n^{(2)} \cdot c_\beta \quad (2.29)$$

подставив (2.26) в (2.29), получим

$$\sum_{\alpha=1}^K \underbrace{\left\langle \psi_{n\beta}^{(0)} \right| \widehat{H}_I \widehat{G}_0 (E_n^{(0)}) \widehat{H}_I \left| \psi_{n\alpha}^{(0)} \right\rangle}_{H_{\beta\alpha}^{(2)}} \cdot c_\alpha = E_n^{(2)} c_\beta \quad (2.30)$$

Теория возмущений для близких уровней

Пусть имеется, например, 4 близких уровней энергии, а других уровней - нет. То есть, для таких уровней справедливо

$$\left| \langle \psi_n | \widehat{H}_I | \psi_m \rangle \right| \sim |E_n - E_m| \quad (2.31)$$

Несмотря на то, что (2.31) явно противоречит условию применимости теории возмущений (1.16), можно привести гамильтониан этой системы к виду, допускающему применение теории возмущений.

Итак, пусть гамильтониан системы имеет вид

$$\widehat{H}_0 + \widehat{H}_I = \begin{pmatrix} E_1 & & & 0 \\ & E_2 & & \\ & & E_3 & \\ 0 & & & E_4 \end{pmatrix} + \widehat{H}_I \quad (2.32)$$

Преобразуем его к новому гамильтониану

$$\begin{aligned} \widehat{H}_0 + \widehat{H}_I &= \underbrace{\begin{pmatrix} E_1 & & & 0 \\ & E_2 & & \\ & & E_3 & \\ 0 & & & E_4 \end{pmatrix}}_{\widehat{H}_0} + \widehat{H}_I = \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} E_3 & & & 0 \\ & E_3 & & \\ & & E_3 & \\ 0 & & & E_3 \end{pmatrix}}_{\widehat{H}_0} + \underbrace{\begin{pmatrix} E_1 - E_3 & & & 0 \\ & E_2 - E_3 & & \\ & & 0 & \\ 0 & & & E_4 - E_3 \end{pmatrix}}_{\widehat{H}_I} + \widehat{H}_I \quad (2.33) \end{aligned}$$

Хотя и новый гамильтониан \widehat{H}_0 имеет один вырожденный уровень, но гамильтониан $\widehat{H}_0 + \widehat{H}_I$ удовлетворяет условию применимости теории возмущений.

Таким образом, вместо 4-х невырожденных уровней, для которых нельзя применять теорию возмущений получаем один четырёхкратно вырожденный уровень, для которого теорию возмущений применять можно.

То есть, для того, чтобы применить теорию возмущений к системе с близкими энергетическими уровнями, нужно модифицировать гамильтониан системы так, чтобы все близкие невырожденные уровни становились одним вырожденным, а всё остальное становилось малой поправкой.

Тождественные частицы

Тождественные частицы - это частицы, у которых совпадают все квантовые числа (m, e, s, \dots).

Принцип неразличимости тождественных частиц. Если в системе с тождественными частицами поменять местами две тождественные частицы, то состояние системы не изменится.

В квантовой механике принцип появляется из-за отсутствия у частиц траекторий (См. рис. 2.3).

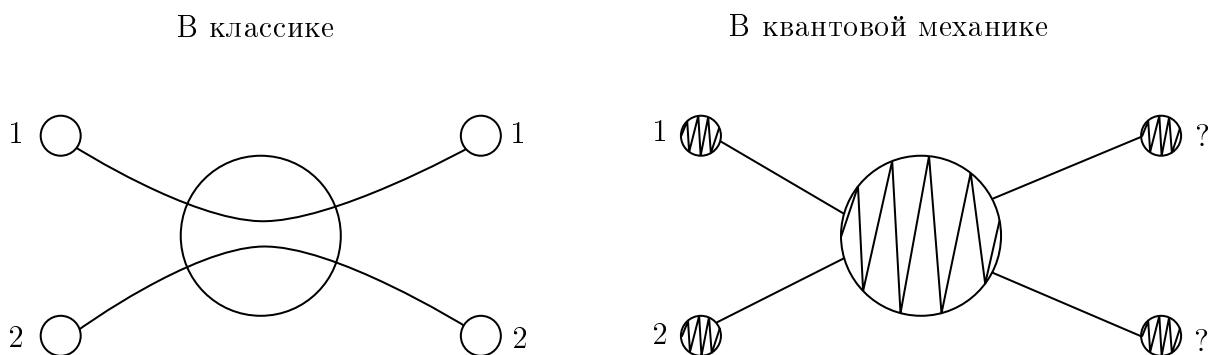


Рис. 2.3. Визуализация неразличимости тождественных частиц

Пусть индекс «1» - индекс первой частицы, «2» - второй.

Базис 1-й частицы: $\psi_n(x_1)$; базис 2-й частицы - тот же самый: $\psi_n(x_2)$. Тогда базис в пространстве состояний составной системы:

$$\psi_n(x_1) \cdot \psi_m(x_2) \quad (2.34)$$

Произвольная волновая функция такой системы будет иметь вид

$$\sum_{nm} c_{nm} \psi_n(x_1) \psi_m(x_2) = \psi(x_1, x_2) \quad (2.35)$$

Пусть теперь эти частицы - тождественные, тогда оператор их перестановки (из-за произвольности фазы) даёт:

$$\widehat{P}_{12} \psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = c \psi(x_1, x_2), \quad (2.36)$$

где $c = e^{i\varphi}$.

Поскольку частицы - тождественные, то

$$\widehat{P}_{12}^2 = 1 \Rightarrow \widehat{P}_{12}^2 = \psi(x_1, x_2) = c^2 \psi(x_1, x_2) \Rightarrow c^2 = 1 \Rightarrow c = \pm 1 \quad (2.37)$$

Если для частицы $c = +1$, то такая частица называется бозоном. У бозонов целый спин.

Пример
 γ, W^\pm, Z, g (8 штук глюонов).

Лекция 3

Системы тождественных частиц

Для тождественных частиц

$$\hat{P}_{12}\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = \underbrace{\pm 1}_c \cdot \psi(x_1, x_2) \quad (3.1)$$

Если в (3.1) для частицы стоит «+1», то такие частицы называются бозонами, у них целый спин.

Пример

Переносчики взаимодействий: γ (электромагнитное взаимодействие); W^\pm, Z (слабое); g (сильное).

Составные: π^\pm, π^0 .

Теперь требуется доказать, что c из (3.1) не меняет знак для одних и тех же частиц в зависимости от состояния. Докажем это из принципа суперпозиции.

Если $c = +1$ для $\psi(x_1, x_2)$, то для $\chi(x_1, x_2)$ оно должно быть таким же, так как состояние

$$\alpha\psi + \beta\chi = \xi \quad (3.2)$$

тоже некоторое состояние, для которого $c = \pm 1$, что возможно, только если c для χ такое же, как для ψ .

Такое же утверждение можно сформулировать для системы N тождественных частиц. Если на систему из N бозонов подействовать оператором \hat{P}_{ij} , который меняет местами i -ую и j -ую частицы, то их волновая функция

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (3.3)$$

перейдёт в саму себя с константой $c = +1$.

Более общее утверждение доказывается в теореме из квантовой теории поля.

Пусть поле $\tilde{A}(t, x)$ квантуется. Полученная конструкция описывает систему частиц

$$1 \leftrightarrow 2 \leftrightarrow 3 \leftrightarrow \dots \quad (3.4)$$

Если у частиц системы (3.4) спин полуцелый, то они - фермионы, и все их волновые функции антисимметричны относительно перестановок частиц. Если - целый, то бозоны, и их волновые функции симметричны относительно перестановок частиц.

Таким образом, для бозонов верно:

$$\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = +1\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (3.5)$$

для фермионов:

$$\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = -1\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (3.6)$$

Фермионы

Пример

Кварки: u, d, c, s, t, b ; лептоны: $e, \nu_e, \mu, \nu_\mu, \tau, \nu_\tau$; составные частицы: андроны: p, n, \dots

Базис в пространстве состояний тождественных частиц

Пусть имеется N нетождественных частиц, тогда базис в пространстве состояний такой системы будет иметь вид

$$|\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \cdots \psi_{n_N}(x_N)\rangle, \quad (3.7)$$

а их произвольная волновая функция есть

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_N} c_{n_1 n_2 \dots n_N} |\psi_{n_1}(x_1) \cdots \psi_{n_N}(x_N)\rangle \quad (3.8)$$

Тождественные фермионы

Пусть теперь эти частицы - тождественные фермионы. Так как их волновые функции полностью антисимметричны относительно перестановок частиц, то волновая функция такой системы получится в результате полной антисимметризации (ПАС) (3.7):

$$\text{ПАС} [\psi_{n_1}(x_1) \cdots \psi_{n_N}(x_N)] = \sum_p (-1)^{C_p} \psi_{n_1}(x_{p_1}) \psi_{n_2}(x_{p_2}) \cdots \psi_{n_N}(x_{p_N}), \quad (3.9)$$

где C_p - это чётность перестановки частиц, а сумма в (3.9) берётся по всем перестановкам. Рассмотрим примеры

Пример

Парные перестановки:

p_1	1	2
p_2	2	1
C_p	+1	-1

$$(3.10)$$

Тройные перестановки

p_1	1	2	1	3	2	3
p_2	2	1	3	2	3	1
p_3	3	3	2	1	1	2
C_p	+1	-1	-1	-1	+1	+1

$$(3.11)$$

Из линейной алгебры известно, что (3.9) представляет собой определитель Слэтера:

$$\sum_p (-1)^{C_p} \psi_{n_1}(x_{p_1}) \psi_{n_2}(x_{p_2}) \cdots \psi_{n_N}(x_{p_N}) \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \det ||\psi_{n_i}(x_j)||_{N \times N} \quad (3.12)$$

Из определения волновой функции системы N тождественных фермионов (3.9) сразу вытекает принцип Паули: если в ней две частицы будут находиться в одинаковых состояниях, то эта функция будет тождественно равной нулю.

Пример

Рассмотрим базисный вектор в пространстве состояний системы из двух тождественных фермионов. Он имеет вид:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)) \quad (3.13)$$

Произвольная волновая функция такой системы будет иметь вид:

$$\psi(x_1, x_2) = \sum_{n < m} C_{nm} \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_n(x_1)\psi_m(x_2) - \psi_n(x_2)\psi_m(x_1)) = -\psi(x_2, x_1) \quad (3.14)$$

Это фундаментальное свойство волновых функций пространства состояний тождественных фермионов. В пределе, при отсутствии взаимодействия, состояние (3.13) обладает какой-то определённой энергией.

Тождественные бозоны

Базисный вектор в пространстве полностью симметричных относительно перестановки частиц для системы тождественных бозонов получается с помощью операции полной симметризации (ПС) (3.7), а именно

$$\text{ПС} [\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \cdots \psi_{n_N}(x_N)] = \sum_p \psi_{n_1}(x_{p_1}) \cdots \psi_{n_N}(x_{p_N}) \cdot \frac{1}{\sqrt{N!}} \quad (3.15)$$

Однако такой вектор может быть недонормированным из-за отсутствия принципа Паули для бозонов.

Пример

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_1(x_2)\psi_1(x_1)) = 2\psi_1(x_1)\psi_1(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.16)$$

Аналогично для трёхчастичной функции

$$\begin{aligned} \psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) \rightarrow 2 [\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)\psi_2(x_3) + \\ + \psi_1(x_2)\psi_1(x_3)\psi_2(x_1) + \psi_1(x_3)\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)] \frac{1}{\sqrt{6}} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Правильная нормировка должна учитывать то, что в одном состоянии может находиться более одной частицы. Пусть

$$\underbrace{n_1 = n_2 = n_3}_{m_1=3}; \underbrace{n_4 = n_5}_{m_2=2}; \underbrace{n_6}_{m_3=1}; \underbrace{n_7 = n_8}_{m_4=2}; \dots \quad (3.18)$$

Тогда правильно нормированный базисный вектор будет

$$\sum_p \psi_{n_1}(x_{p_1}) \cdots \psi_{n_N}(x_{p_N}) \cdot \frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{m_1! \cdot m_2! \cdots m_M!}}, \quad (3.19)$$

где

$$\sum_k m_k = N \quad (3.20)$$

Произвольная волновая функция системы тождественных бозонов - это функция $\psi(x_1, \dots, x_N)$ полностью симметричная относительно перестановок своих аргументов.

Наблюдаемые в пространстве состояний тождественных частиц

Пусть два электрона неподвижны в пространстве. Тогда у них остаются лишь степени свободы, связанные с их ориентацией спинов.

В случае, к примеру, протонов, такая система находилась бы в четырёхмерном гильбертовом пространстве:

$$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \quad (3.21)$$

Однако волновая функция электронов полностью антисимметрична относительно перестановок частиц. Заметим, что

$$\text{ПАС} [|\uparrow\uparrow\rangle] = |\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\rangle = 0 \quad (3.22)$$

Тогда, учитывая (3.22), получим, что гильбертово пространство, соответствующее данной системе, состоит из одной степени свободы, определяемой вектором

$$\text{ПАС} [|\uparrow\downarrow\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (3.23)$$

Заметим, что в данной системе $\hat{S}_z^{(1)}$ - не является наблюдаемой, что можно объяснить двумя способами.

- 1) Физический смысл: $\hat{S}_z^{(1)}$ нельзя отличить от $\hat{S}_z^{(2)}$, так как частицы - тождественные.
- 2) Математическое объяснение: $\hat{S}_z^{(1)}$ не является оператором в рассматриваемом гильбертовом пространстве

Пусть

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (3.24)$$

тогда

$$\hat{S}_z^{(1)} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(+\frac{1}{2} \right) |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{2} \right) |\downarrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (3.25)$$

Получившийся в (3.25) вектор не принадлежит гильбертову пространству рассматриваемой системы

Таким образом, всякая наблюдаемая в пространстве состояний тождественных бозонов, или фермионов, должна быть полностью симметрична относительно перестановок любой пары частиц.

Иными словами, если \hat{A} - наблюдаемая, то

$$\hat{A}_{i\leftrightarrow j} \equiv \hat{P}_{ij} \hat{A} \hat{P}_{ij} \equiv \hat{A} \quad (3.26)$$

Доказательство

Пусть есть какие-либо состояния системы тождественных частиц $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$. Тогда

$$\langle\chi| \underbrace{\frac{1}{\hat{P}_{ij}^2}}_{\cdot \hat{A} \cdot} \underbrace{\frac{1}{\hat{P}_{ij}^2}}_{|\psi\rangle} = \underbrace{\langle\chi| \hat{P}_{ij}}_{\langle\chi|(\pm 1)} \underbrace{\left(\hat{P}_{ij} \hat{A} \hat{P}_{ij} \right)}_{\hat{A}_{i \leftrightarrow j}} \underbrace{\hat{P}_{ij} |\psi\rangle}_{(\pm 1)|\psi\rangle} = \langle\chi| \hat{A}_{i \leftrightarrow j} |\psi\rangle = \langle\chi| \hat{A} |\psi\rangle \quad (3.27)$$

Так как $|\chi\rangle$ и $|\psi\rangle$ - произвольные, то из (3.27) следует

$$\hat{A} \equiv \hat{A}_{i \leftrightarrow j} \quad (3.28)$$

Наблюдаемые при $s = \frac{1}{2}$ для двух спинов:

$$\hat{S}_z^{(1)} + \hat{S}_z^{(2)} \rightarrow 0 \quad (\text{в данном (3.24) состоянии}) \quad (3.29)$$

$$\hat{S}_z^{(1)} \cdot \hat{S}_z^{(2)} \rightarrow -\frac{1}{4} \quad (\text{в данном (3.24) состоянии}) \quad (3.30)$$

Многоэлектронный атом

Рассмотрим многоэлектронный атом с электронной оболочкой из N электронов. Поскольку будем рассматривать электронейтральный атом, то в нашем случае зарядовое число будет равно N ($Z = N$).

Гамильтониан такой системы будет иметь вид

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{k=1}^N \frac{\hat{p}_k^2}{2m}}_{\hat{H}_0} - \frac{Ze^2}{r_k} + \underbrace{\sum_{k < l} \frac{e^2}{r_{kl}}}_{\hat{H}_I}, \quad (3.31)$$

где \hat{H}_I - учитывает взаимодействие электронов друг с другом, а \hat{H}_0 - гамильтониан системы в кулоновском потенциале. Решения для \hat{H}_0 нам уже известны:

$$\text{ПАС} [\psi_{n_1, l_1, m_1}(x_1) \cdots \psi_{n_N, l_N, m_N}(x_N) \cdot |\uparrow\rangle_1 \cdot |\downarrow\rangle_2 \cdots |\downarrow\rangle_N] \quad (3.32)$$

для удобства введём обозначение

$$|\uparrow\rangle_1, |\downarrow\rangle_2, ; |\downarrow\rangle_N = m_{s_1}, m_{s_2}, \dots, m_{s_N}, \quad (3.33)$$

где $m = \pm \frac{1}{2}$.

Заметим, что нельзя использовать теорию возмущений для гамильтонианов \hat{H}_0 и \hat{H}_I , так как \hat{H}_I описывает потенциал, создаваемый другими электронами, для какого-либо отдельного электрона, и в зависимости от расположения электрона относительно других, потенциал может сильно различаться, в результате чего не сможет удовлетворять условию применимости теории возмущений (См. рис. 3.1).

Вспомним, что конфигурация многоэлектронного атома имеет вид

$$\underbrace{1}_{n} \underbrace{s^2}_{l} 2s^2 2p^3 \quad (3.34)$$

подчёркнутая часть в конфигурации (3.34) означает, что у двух электронов $n_1 = n_2 = 1$; $l_1 = l_2 = 0$. Однако, орбитальный момент l может возникнуть только в

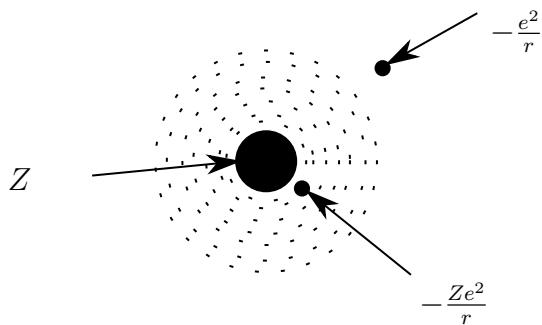


Рис. 3.1. Зависимость вида \hat{H}_I от расположений электронов

сферически симметричном потенциале, что означает, что хотя бы в каком-то приближении потенциал многоэлектронного атома сферически симметричный, но не кулоновский.

Различие потенциала многоэлектронного атома и кулоновского потенциала можно увидеть в расположении их уровней энергии (См. рис. 3.2).

В кулоновском потенциале

S ————— p —————

S —————

В многоэлектронном атоме

S ————— p —————

S —————

Рис. 3.2. Схема уровней в кулоновском потенциале и многоэлектронном атоме

Сдвиг уровней энергии для p -подуровня связано с экранировкой, что видно из вида волновых функций электрона для разных подуровней (См. рис. 3.3).

Приближение центрально-симметричного самосогласованного поля (центрального поля)

Для решения задачи многоэлектронного атома применяют приближение центрально-симметричного самосогласованного поля. Для этого гамильтониан системы приводят к следующему виду:

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{k=1}^N \left\{ \frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \hat{V}(r_k) \right\}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\sum_{k=1}^N \left\{ -\hat{V}(r_k) - \frac{Ze^2}{r_k} \right\} + \sum_{k < l} \frac{e^2}{r_{kl}}}_{\hat{H}_I}, \quad (3.35)$$

где $\hat{V}(r_k)$ - неизвестный потенциал, центрально-симметричная часть самосогласованного поля, $\hat{V}(r_k)$ подбирается таким образом, чтобы гамильтонианы \hat{H}_0 и \hat{H}_I удовлетворяли условиям применимости теории возмущений.

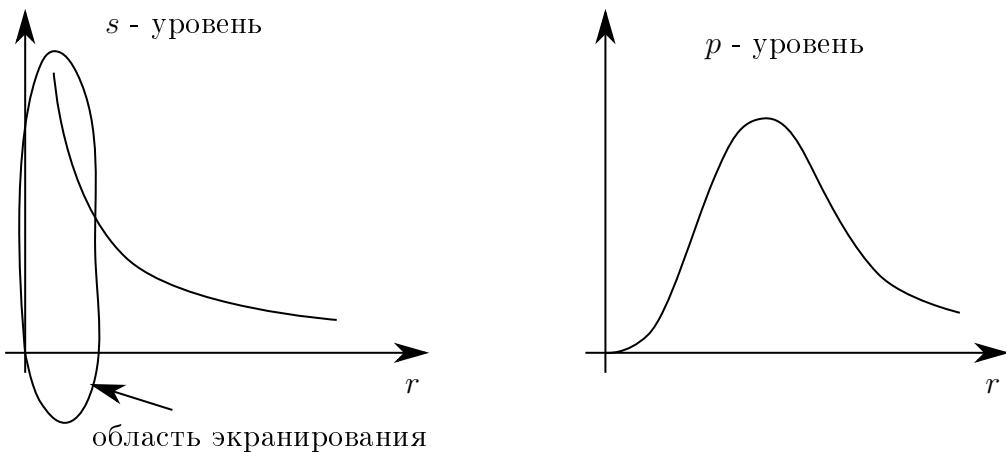


Рис. 3.3. Волновые функции для s - и p -подуровней электронов в многоэлектронном атоме

В таком случае, волновая функция системы будет иметь вид

$$\text{ПАС} \left[\tilde{\psi}_{n_1, l_1, m_1}(x_1) \tilde{\psi}_{n_2, l_2, m_2}(x_2) \cdots \tilde{\psi}_{n_N, l_N, m_N}(x_N) |\uparrow\rangle_1 \cdots |\downarrow\rangle_N \right], \quad (3.36)$$

где $\tilde{\psi}_{n_i, l_i, m_i}$ - некоторая не кулоновская волновая функция; n_i - не главное квантовое число, а его аналог для самосогласованного потенциала $\hat{V}(r_k)$.

Квантово-механическое определение конфигурации состояния - это набор квантовых чисел, которые формируют состояние и энергию системы в нулевом приближении (в приближении центрального или самосогласованного поля).

Тогда $(n_1, l_1; n_2, l_2; \dots; n_N, l_N)$ - определяют энергию. Конфигурация - сильно вырожденное состояние, поскольку числа $(m_1, m_{s_1}; m_2, m_{s_2}; \dots; m_N, m_{s_N})$ - не влияют на энергию системы, но определяют волновую функцию.

Таким образом, нулевое приближение к энергии - это приближение центрально-симметричного самосогласованного поля.

Методы нахождения центрально-симметричного самосогласованного потенциала

Потенциал $\hat{V}(r_k)$ можно находить методом итерации, и в качестве нулевого приближения использовать кулоновские волновые функции.

Из кулоновских функций находят ПАС волновую функцию относительно перестановок частиц, после чего по ней находят потенциал, в котором находится отдельно взятый электрон $W(r_1)$. Из него достают сферически-симметричную часть $\hat{W}_2(r_1)$. Откуда находят первое приближение

$$\hat{W}_2(r_1) \rightarrow V^{(1)}(r_1) \quad (3.37)$$

После этого для $V^{(1)}(r_1)$ решается сферически-симметричная задача, из которой находятся волновые функции и уровни энергии. В этом приближении определяется ПАС волновые функции, и с ними ищется следующее приближение к центрально-симметричному самосогласованному потенциалу ($V^{(2)}(r_1)$) и т. д.

Для отыскания достаточно точного приближения такого потенциала $\hat{V}(r_k)$ у малоэлектронных атомов потребуется 3 – 4 итерации; для среднеэлектронного - 5 – 6 итераций; если атом тяжёлый, то $\div 10$. Критерий сходимости таких приближений следующий: ряд сходится, если в пределах ошибок

$$V^{(k+1)}(r_1) \approx V^{(k)}(r_1) \quad (3.38)$$

Лекция 4

Приближение центрального поля

Итак, мы рассматриваем систему, основной гамильтониан которой

$$\hat{H}_0 = \sum_{k=1}^N \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m} + \hat{V}(r_k) \right), \quad (4.1)$$

где \hat{V} - главная часть сферически-симметричного потенциала. Добавка к гамильтониану:

$$\hat{H}_I = \sum_{k=1}^N \left(-\hat{V}(r_k) - \frac{Ze^2}{r_k} \right) + \sum_{k < l} \frac{e^2}{r_{kl}} \quad (4.2)$$

Волновые функции $\tilde{\psi}_{nlm}(\bar{x})$ являются решениями для гамильтониана (4.1) (но не являются кулоновскими) и соответствуют энергиям E_{nl} .

Таким образом, базисные векторы пространства состояний такой системы имеют вид

$$\text{ПАС} \left[\tilde{\psi}_{n_1 l_1 m_1}(\bar{x}_1) \cdots \tilde{\psi}_{n_N l_N m_N}(\bar{x}_N) \cdot |\uparrow\rangle_1 \cdot |\downarrow\rangle_2 \cdots |\uparrow\rangle_N \right] \quad (4.3)$$

(Для каждого электрона создаётся сферически-симметричный потенциал \hat{V})

Конфигурация электронов в многоэлектронном атоме вырождена (См. рис. 4.1):

Конфигурация	n_1, l_1	\dots	n_N, l_N	
Вырождение	m_1	\dots	m_N	
	m_{s_1}	\dots	m_{s_N}	

(4.4)

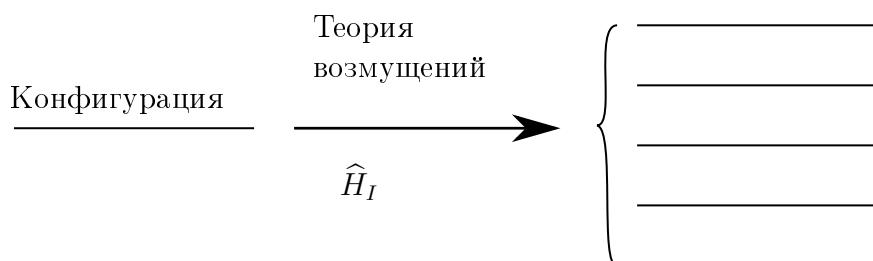


Рис. 4.1. Вырождение электронной конфигурации многоэлектронного атома

Пусть

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad (4.5)$$

тогда уровни энергии будут характеризоваться не только самим значением энергии, но и значением наблюдаемой \hat{A} (так как она совместима с гамильтонианом и у них общий базис).

В таком случае, интегралы движения у многоэлектронного атома:

Орбитальный момент

$$\vec{L} = \sum_{k=1}^N \vec{e}^{(k)} \quad (4.6)$$

Полный набор наблюдаемых для орбитального момента: \vec{L}^2, L_z

Заметим

$$[L_x, L_y] \neq 0 \quad (4.7)$$

из (4.7) следует, что уровни энергии в таком случае будут вырождены. Что понятно из известной с первого семестра теоремы.

Теорема.

Если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ и $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$, но $[\hat{B}, \hat{C}] \neq 0$, то спектр \hat{A} вырожден.

Перейдём к операторам:

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad (4.8)$$

Заметим, что оператор \hat{L}_\pm не является наблюдаемой (не эрмитов), но

$$[\hat{L}_\pm, \hat{H}] = 0 \quad (4.9)$$

\hat{L}_\pm - сдвиговый оператор, из (4.9) следует, что этот сдвиг не изменяет уровня энергии (изменяет на $[\hat{L}_\pm, \hat{H}] = 0$). Вспомним, схожий оператор

$$\hat{J}_\pm |JM\rangle = \sqrt{\dots} |JM \pm 1\rangle \quad (4.10)$$

По аналогии с (4.10) становится ясно, что \hat{L}_\pm увеличивает (уменьшает) L_z на ± 1 . Таким образом, уровни энергии вырождены по L_z .

Теперь рассмотрим $\hat{\overline{S}}^{(1)}$. Известно, что

$$[\hat{\overline{S}}^{(1)}, \hat{H}] = 0 \quad (4.11)$$

так как в \hat{H} нет части со спином. Однако $\hat{\overline{S}}^{(1)}$ не является наблюдаемой. Построим оператор полного спина

$$\hat{\overline{S}} = \sum_{k=1}^N \hat{\overline{S}}^{(k)} \quad (4.12)$$

$\hat{\overline{S}}$ является наблюдаемой, и

$$[\hat{\overline{S}}, \hat{H}] = 0 \quad (4.13)$$

Однако отдельные компоненты спина не коммутируют между собой. Тогда построим оператор по аналогии с (4.8)

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad (4.14)$$

Рассуждая, как и для орбитального момента, находим, что уровни энергии вырождены и по S_z .

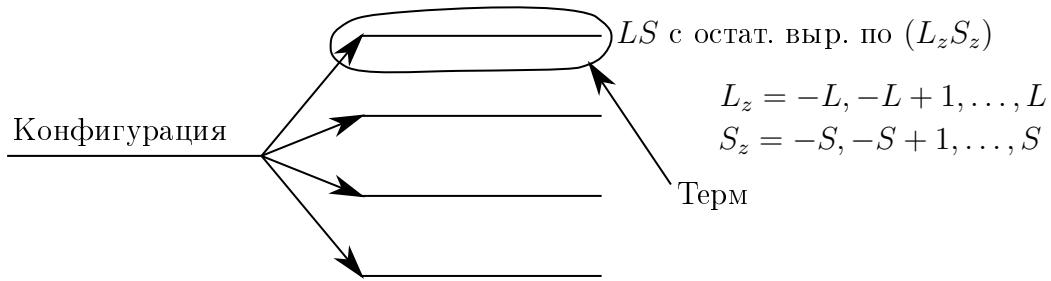


Рис. 4.2. Расщепление конфигурации многоэлектронного атома на термы с остаточным вырождением

Таким образом получаем, что электронная конфигурация распадается на термы с соответствующими им квантовыми числами L, S . Термы в свою очередь тоже вырождены по L_z, S_z (См. рис. 4.2).

Терм вырожден по L_z, S_z , то есть его кратность вырождения равна $(2L + 1)(2S + 1)$.

Термы обладают разной энергией, их взаимное расположение по энергиям определяется правилами Хунда.

1-е правило Хунда

Чем больше у терма S , тем меньше его энергия E .

2-е правило Хунда

Если у двух термов $S_1 = S_2$, то терм, у которого больше L , обладает меньшей энергией.

Пример

Пусть имеется следующая электронная конфигурация

$$1s^2 2s^2 2p^3 \quad (4.15)$$

Нужно найти все термы этой конфигурации.

Очевидно, что $1s^2 2s^2$ не дают вклад в L, S (хотя они и дают вклад в $\hat{V}(r)$). Остается 3 эквивалентных электрона:

$$\begin{aligned} p : l = 1 \Rightarrow m &= 1, 0, -1 \\ m_s &= \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Поскольку m и m_s меняются независимо, то у каждого электрона может быть 6 состояний. Значит, вспоминая комбинаторику, находим, что кратность вырождения конфигурации:

$$C_n^k = \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!} = \begin{bmatrix} n = 6 \\ k = 3 \end{bmatrix} = \frac{6 \cdot 5 \cdot 4}{3!} = 20 \quad (4.17)$$

Такую задачу можно решить перебором всех состояний и определением, какому терму они соответствуют, однако так можно сделать не всегда.

Пример

Рассмотрим конфигурацию $3d^3$ (заполненные оболочки опускаются). Посчитав аналогичным образом её кратность, получим

$$3d^3 \rightarrow \frac{10 \cdot 9 \cdot 8}{3!} = 120 \text{ состояний} \quad (4.18)$$

Очевидно, что перебрать все состояния данной конфигурации будет проблематично. Но можно разбить конфигурацию на термы и без перебора всех состояний.

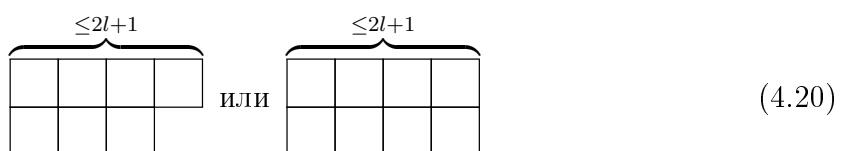
Диаграмма Юнга

Пусть имеется конфигурация nl^k . Чтобы разбить её на термы можно воспользоваться диаграммой Юнга.

Одноэтажная диаграмма Юнга в таком случае будет иметь вид строки из k клеток



Мы будем пользоваться двухэтажной спиновой диаграммой Юнга из двух строк, во второй из которых не больше клеток, чем в первой, а первой - не больше, чем $2l + 1$, общее количество клеток в диаграмме равно k :



В спиновую диаграмму Юнга вписываются всевозможными способами значения проекции спина, мы будем делать это стрелками \uparrow или \downarrow . Число расстановок в строке будет 2^k :



Спиновая диаграмма Юнга

Чтобы определить термы конфигурации по диаграмме Юнга, выписывают все возможные двухэтажные диаграммы Юнга для данной конфигурации, заполняют их всевозможными способами, после чего для каждой из вариаций диаграммы руководствуются следующим алгоритмом:

- 1) Реализовать ПС по строкам: сначала по 1-й, потом по 2-й, если есть.
- 2) Над результатом провести ПАС по столбцам.
- 3) Выделить из полученного линейно независимые комбинации (ЛНЗ).
- 4) Вычислить полную проекцию спина S_z соответствующего каждой из них:

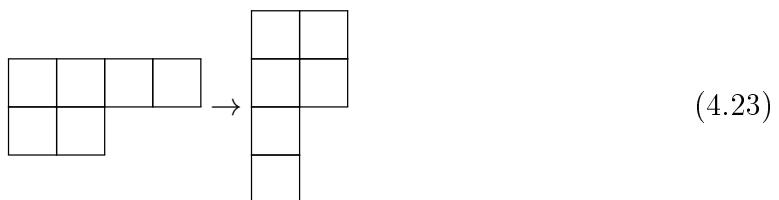
$$S_z = S_z^{(1)} + S_z^{(2)} + \cdots + S_z^{(k)} \quad (4.22)$$

- 5) Полученные S_z объединить во все проекции каких-либо значений спина S . Откуда берутся S .

Пример

Если $S - z : \underline{1}; \underline{0}; \underline{0}; \underline{-1}$, то $\underline{S = 1}; \underline{S = 0}$

После этого нужно провести сопряжение полученной диаграммы. Для этого нужно построить из клеток её транспонированный вариант (либо просто отразить клетки относительно прямой, под углом в 45° выходящей из левого верхнего угла):



Полученная сопряжённая диаграмма называется координатной диаграммой Юнга.

Координатная диаграмма Юнга

В клетки координатной диаграммы Юнга расставляют значения $m = -L, \dots, L$. Полное число расстановок $(2l + 1)^k$. После чего руководствуются следующим алгоритмом:

- 1) Реализовать ПС по строкам: сначала по 1-й, потом по 2-й, если есть.
- 2) Над результатом провести ПАС по столбцам.
- 3) Выделить из полученного линейно независимые комбинации (ЛНЗ).
- 4) Вычислить полную проекцию орбитального момента L_z , соответствующую каждой из них:

$$L_z = m_1 + m_2 + \dots + m_k \quad (4.24)$$

- 5) Полученные L_z объединить во все проекции каких-либо значений L . Откуда берутся L .

Из полученных с помощью диаграмм наборов S_i и L_i составляют всевозможные термы для какой-либо вариации диаграммы. Выполнив это для всех диаграмм Юнга для данной конфигурации, получают все термы данной конфигурации.

Пример

Будем заполнять клетки в общем случае объектами (a, b, c, d, \dots) . Пусть имеется 4 эквивалентных электрона, составим для них, например, следующую диаграмму и реализуем на ней первые два пункта описанного выше алгоритма.



1) ПС (4.25) по 1-й строке:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} \quad (4.26)$$

ПС (4.26) по 2-й строке:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline d & c \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline d & c \\ \hline \end{array} \quad (4.27)$$

2) ПАС (4.27) по 1-му столбцу:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline d & c \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline d & c \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline c & b \\ \hline a & d \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline c & a \\ \hline b & d \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline d & b \\ \hline a & c \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline d & a \\ \hline b & c \\ \hline \end{array} \quad (4.28)$$

ПАС (4.28) по второму столбцу:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline c & d \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline d & c \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline d & c \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline c & b \\ \hline a & d \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline c & a \\ \hline b & d \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline d & b \\ \hline a & c \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline d & a \\ \hline b & c \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline a & d \\ \hline c & b \\ \hline \end{array} - \dots - \dots - \dots + \begin{array}{|c|c|} \hline c & d \\ \hline a & b \\ \hline \end{array} + \dots + \dots + \dots \quad (4.29)$$

Пример

Два эквивалентных электрона. Можно построить только две диаграммы для данного случая:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \quad & \quad \\ \hline \quad & \quad \\ \hline \end{array}, \quad \begin{array}{|c|c|} \hline \quad & \quad \\ \hline \quad & \quad \\ \hline \end{array} \quad (4.30)$$

Рассмотрим сперва диаграмму в одну строку $\left(\begin{array}{|c|c|} \hline \quad & \quad \\ \hline \end{array}\right)$. Из-за ПС по строке, менять их местами не имеет смысла:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline a & a \\ \hline \end{array}; \quad \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline \end{array} : \begin{array}{l} \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline b & a \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline a & b \\ \hline \end{array} \end{array} \quad (4.31)$$

В диаграмму в две строки $\left(\begin{array}{|c|c|} \hline \quad & \quad \\ \hline \quad & \quad \\ \hline \end{array}\right)$ вписывать одинаковые элементы тоже бессмыс- ленно из-за ПАС по столбцу. А вот разные объекты - можно, но, как и в случае предыдущей диаграммы нет смысла менять их местами:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline a & \\ \hline a & \\ \hline \end{array} \rightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline a & \\ \hline a & \\ \hline \end{array} - \begin{array}{|c|c|} \hline a & \\ \hline a & \\ \hline \end{array} = 0 \quad (4.32)$$

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc|c} & a & a & b \\ & b & b & a \end{array} \\ \rightarrow \\ \begin{array}{ccc|c} & a & b & a \\ & b & a & b \end{array} \end{array} \quad (4.33)$$

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc|c} & b & b & a \\ & a & a & b \end{array} \\ \rightarrow \\ \begin{array}{ccc|c} & b & a & b \\ & a & b & a \end{array} \end{array}$$

Из последнего примера очевидно, что если в столбце или строке диаграммы находятся два одинаковых элемента, то диаграмма зануляется. Отсюда понятно, почему для многоэлектронных атомов нельзя построить диаграмму в три строки (в спиновой диаграмме в столбце с тремя строками найдутся два одинаковых направления стрелок). Также ясно, почему число клеток в строке должно быть $\leq (2l + 1)$: при сопряжении диаграммы образуется столбец, в который нужно будет вписывать значения m , а максимально возможное количество различных значений m равно $(2l + 1)$.

Пример

В качестве примера найдём с помощью диаграмм Юнга все термы конфигурации $2p^2$. В данной конфигурации $k = 2$, соответственно существуют две подходящие диаграммы:

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cc} \square & \square \end{array}; \quad \begin{array}{c} \square \\ \square \end{array} \end{array} \quad (4.34)$$

Рассмотрим первую из них. Спины электронов равны $s = 1/2$. Из разобранного выше примера понятны возможные линейно независимые варианты её заполнения:

$$\begin{array}{c} \begin{array}{cc} \uparrow & \uparrow \end{array} \quad S_z = 1 \\ \begin{array}{cc} \downarrow & \uparrow \end{array} \quad 0 \\ \begin{array}{cc} \downarrow & \downarrow \end{array} \quad -1 \end{array} \quad (4.35)$$

из (4.35) S_z можно объединить в проекции $S = 1$.

Координатная диаграмма Юнга для неё будет столбцом. Из примера понятно, как его можно заполнить. Учитывая что $l = 1 \Rightarrow m = -1; 0; 1$, получим:

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} & \begin{array}{c} 1 \\ -1 \end{array} & \begin{array}{c} 0 \\ -1 \end{array} \end{array} \quad (4.36)$$

$$L_z : \quad 1 \quad 0 \quad -1 \quad \rightarrow L = 1$$

Таким образом, получим для данной диаграммы один терм:

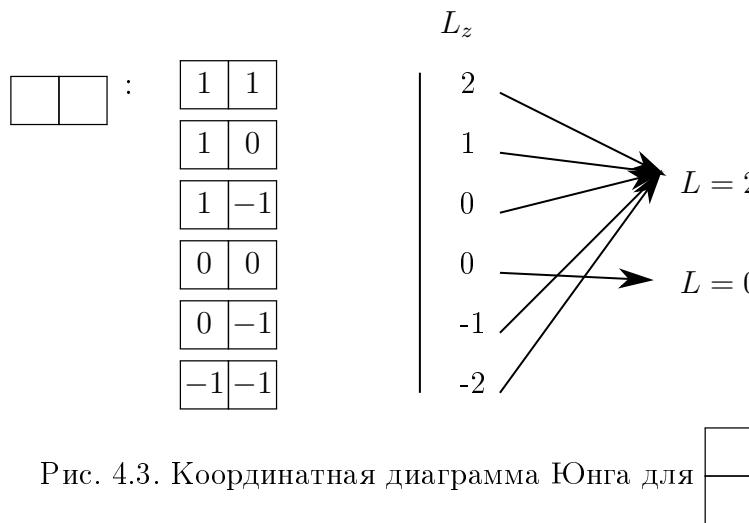
$$\begin{array}{c} \square \quad \square \end{array} \rightarrow L = 1, S = 1 : \quad {}^3P \quad (4.37)$$

Кратность этого терма равна: $(2L+1)(2S+1 = 9)$, а полное количество состояний в данной конфигурации: $\frac{6 \cdot 5}{2!} = 15$.

Рассмотрим вторую вариацию диаграммы (4.34). Сперва спиновая часть:

$$\begin{array}{|c|} \hline \uparrow \\ \hline \downarrow \\ \hline \end{array} \rightarrow S_z = 0 \rightarrow S = 0 \quad (4.38)$$

Аналогично предыдущему, расписываем координатную диаграмму (См. рис. 4.3).



Итак, для такой диаграммы имеем: $S = 0; L = 0; 2$. Из таких значений L и S можно составить следующие термы:

$$\begin{array}{ll} \text{Термы:} & ^1D \quad ^1S \\ \text{Кратность вырождения:} & 5 \quad 1 \end{array} \quad (4.39)$$

Таким образом данная диаграмма описывает оставшиеся $5 + 1 = 6$ состояний конфигурации. Итого, данная конфигурация разбивается на следующие термы: $^3P; ^1D; ^1S$.

Явный вид волновых функций термов

Пусть имеется волновая функция для некоторой конфигурации, например, $2p^2$. Введём упрощающую запись системы обозначений.

Волновая функция для данной конфигурации имеет вид:

$$\text{ПАС} \left[\tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{21-1}(\bar{x}_2) |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \right] \quad (4.40)$$

Информативная часть записи (4.40) состоит в следующем:

$$\begin{array}{ll} m_1 = 0 & m_{s_1} = -1/2 \\ m_2 = -1 & m_{s_2} = 1/2 \end{array} \quad (4.41)$$

Тогда, для упрощения записи, вводят обозначения

1) 1-я система обозначений

$$\begin{aligned} \text{ПАС} & \left[\tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{21-1}(\bar{x}_2) |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \right] = \\ & = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{21-1}(\bar{x}_2) |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 - \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{21-1}(\bar{x}_1) |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1 \right] \equiv \\ & \equiv \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \quad (4.42) \end{aligned}$$

Тогда запрет Паули принимает вид:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \downarrow & \downarrow \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \downarrow & \downarrow \end{pmatrix} = 0 \quad (4.43)$$

2) 2-я система обозначений (у нас не используется)

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} \equiv f(0-, -1+) \quad (4.44)$$

Вспомним, что:

$$\text{Если } \begin{cases} \hat{J}_+ |\psi\rangle = 0 \\ \hat{J}_z |\psi\rangle = J |\psi\rangle \end{cases} \Rightarrow |\psi\rangle = |JJ\rangle, \quad (4.45)$$

где $|JJ\rangle$ значит, что $M = J$.

Для волновых функций термов аналогичное происходит для L и S .

Лекция 5

Явный вид волновых функций терма

Вспомним признак старшего вектора:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{J}_+ |\psi\rangle = 0 \\ \hat{J}_z |\psi\rangle = J |\psi\rangle \end{array} \right\} \Rightarrow |\psi\rangle = |J, M = J\rangle \quad (5.1)$$

Для того, чтобы построить волновые функции терма нужно воспользоваться признаком, аналогичным (5.1), для операторов \hat{L} и \hat{S} .

Тогда для волновой функции $|\psi\rangle$ имеем

$$\left. \begin{array}{l} \hat{L}_+ |\psi\rangle = 0 \\ \hat{L}_z |\psi\rangle = L |\psi\rangle \\ \hat{S}_+ |\psi\rangle = 0 \\ \hat{S}_z |\psi\rangle = S |\psi\rangle \end{array} \right\} \Rightarrow |\psi\rangle = \left| \text{Конфигурация } , L, \underbrace{M_L}_{L_z} = L, S, \underbrace{M_S}_{S_z} = S \right\rangle \quad (5.2)$$

В дальнейшем обозначение конфигурации в (5.2), как это принято в подобных задачах, будем опускать за ненадобностью.

Вспомним, что

$$\hat{J}_+ |JM\rangle = \sqrt{(J-M)(J+M+1)} |J, M+1\rangle \quad (5.3)$$

Поскольку опускать подчёркнутую часть в (5.3) нельзя, составим для операторов соответствующие «таблицы умножения» (для p электронов). Имеем:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \left| J = \frac{1}{2}, M = \frac{1}{2} \right\rangle \\ |\downarrow\rangle &= \left| J = \frac{1}{2}, M = -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.4)$$

Тогда

$$\hat{s}_+ |\uparrow\rangle = 0; \quad \hat{s}_+ |\downarrow\rangle = \sqrt{1} |\uparrow\rangle, \quad (5.5)$$

где $\sqrt{1}$ - коэффициент пропорциональности порядка $\sqrt{1}$.

Тогда соответственно

$$\begin{aligned} \hat{l}_+ |l=1, m=1\rangle &= 0 \\ \hat{l}_+ |l=1, m=0\rangle &= \sqrt{2} |l=1, m=1\rangle \\ \hat{l}_+ |l=1, m=-1\rangle &= \sqrt{2} |l=1, m=0\rangle \end{aligned} \quad (5.6)$$

Пример

Рассмотрим, для примера, знакомую уже конфигурацию $2p^2$. Один её старший вектор очевиден (он соответствует терму 1D):

$$\left(\begin{array}{cc} \frac{1}{\uparrow} & \frac{1}{\downarrow} \end{array} \right) \Rightarrow \underbrace{\left| l^{(1)} = 1, \underbrace{m_z^{(1)}}_{l_z^{(1)}} = 1 \right\rangle}_{\underline{\underline{l_z^{(1)}}}}; \underbrace{\left| l^{(2)} = 1, \underbrace{m_z^{(2)}}_{l_z^{(2)}} = 1 \right\rangle}_{\underline{\underline{l_z^{(2)}}}} \quad (5.7)$$

Убедимся в этом, проверим выполнение (5.2), учитывая (5.5) и (5.6), получим:

$$\hat{L}_+ \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = (\hat{l}_+^{(1)} + \hat{l}_+^{(2)}) \left(\begin{array}{cc} \frac{1}{\uparrow} & \frac{1}{\downarrow} \\ \downarrow & \downarrow \end{array} \right) = 0 + 0 = 0 \quad (5.8)$$

$$\hat{S}_+ \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = (\hat{s}_+^{(1)} + \hat{s}_+^{(2)}) \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = 0 + \underbrace{\sqrt{1}}_0 \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \uparrow \end{array} \right) = 0 \quad (5.9)$$

$$\hat{L}_z \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = \left(\underbrace{\hat{l}_z^{(1)}}_{m_1=1} + \underbrace{\hat{l}_z^{(2)}}_{m_2=1} \right) \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = 2 \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) \quad (5.10)$$

Аналогично, для оператора проекции спина:

$$\hat{S}_z = \left(\underbrace{\hat{s}_z^{(1)}}_{+\frac{1}{2}} + \underbrace{\hat{s}_z^{(2)}}_{-\frac{1}{2}} \right) \quad (5.11)$$

Получим

$$\hat{S}_z \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = \left(+\frac{1}{2} + \left(-\frac{1}{2} \right) \right) \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) = 0 \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) \quad (5.12)$$

Таким образом, имеем старший вектор терма:

$$|L = 2, M_L = 2, S = 0, M_S = 0\rangle = \left(\begin{array}{cc} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{array} \right) \quad (5.13)$$

У $2p^2$ всего $\frac{6 \cdot 5}{2!} = 15$ состояний. Поскольку терм 1D вырожден и имеет 5 волновых функций, а (5.13) - старший вектор, то из него можно получить остальные 4 с помощью операторов изменяющих проекции спина или орбитального момента (поскольку у данного терма нулевой спин, то его проекция может быть равна только нулю, и остальные его волновые функции можно получить только при воздействии оператора \hat{L}_-).

Пример

Нужно получить волновую функцию для состояния:

$$|L = 2, M_L = 1, S = 0, M_S = 0\rangle \quad (5.14)$$

Вспомним, что

$$\hat{J}_- |JM\rangle = \sqrt{(K+M)(J-M+1)} |JM-1\rangle \quad (5.15)$$

По аналогии с (5.15) получим (5.14) из (5.13), используя \hat{L}_- :

$$\begin{aligned} |L=2, M_L=1, S=0, M_S=0\rangle &= \frac{\hat{L}_-}{\sqrt{(2+2)(2-2+1)}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} (\tilde{l}_-^{(1)} + \tilde{l}_-^{(2)}) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}, \quad (5.16) \end{aligned}$$

заметим, что в (5.16) подчёркнутые слагаемые не являются однородными: в одном под «0» стоит « \uparrow », а в другом - « \downarrow ».

Таким образом, мы обнаружили 5 из 15 волновых функций.

Рассмотрим следующий терм 3P . Не составляется труда догадаться, что его старший вектор:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

Убедимся в этом, проверим выполнение (5.2), учитывая (5.5) и (5.6), получим:

$$\hat{S}_+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} \rightarrow 0 \quad (5.18)$$

$$\hat{L}_+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} = 0 \quad (5.19)$$

$$\hat{L}_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} \rightarrow 1 + 0 = 1 \quad (5.20)$$

$$\hat{S}_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad (5.21)$$

Остальные векторы терма можно получить, применяя \hat{L}_- и \hat{S}_- в нужном количестве и в произвольном порядке:

$$\begin{aligned} \left(\hat{L}_-\right)^k &\rightarrow M_L = L - k \\ \left(\hat{S}_-\right)^j &\rightarrow M_S = S - j \end{aligned} \quad (5.22)$$

Так получатся оставшиеся 8 волновых функций для данного терма.

Остается только одна нетривиальная выкладка для терма 1S . Необходимо, чтобы $L_z = 0$; $S_z = 0$; $(\hat{L}_+, \hat{S}_+) \rightarrow 0$. Первым двум условиям соответствуют следующие волновые функции:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

Из них строится старший и единственный вектор терма. Найдём его, для этого составим из векторов (5.23) линейную комбинацию, и выведем условия на коэффициенты. Итак, пусть

$$|\psi\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \quad (5.24)$$

Для (5.24) L_z и S_z изначально равны нулю. Проверим \hat{L}_+ и \hat{S}_+ .

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ |\psi\rangle &= 0 = \\ &= 0 + \alpha\sqrt{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}_{=} + \beta\sqrt{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}_{=} + \beta\sqrt{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}_{=} + \gamma\sqrt{2} \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}_{=} + 0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \begin{cases} \alpha + \beta = 0 \\ \beta + \gamma = 0 \end{cases} \quad (5.25) \end{aligned}$$

Таким образом, с учётом нормировки волновой функции и (5.25) можно найти коэффициенты для (5.24):

$$\alpha = -\beta = \gamma = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \underbrace{e^{i\varphi}}_{\text{произв. фаза}} \quad (5.26)$$

Значит из (5.24) и (5.26) получаем явный вид волновой функции:

$$|L=0, M_L=0, S=0, M_S=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Правила Хунда (объяснение)

1-е правило Хунда

Возьмём, к примеру, термы

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \uparrow \end{pmatrix}}_{S=1}; \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix}}_{S=0} \quad (5.28)$$

Как известно из 1-го правила Хунда

$$E_1 < E_2 \quad (5.29)$$

В конфигурации $2p^2$ - 15 состояний. Разницу в энергии между ними вносит гамильтониан возмущений \hat{H}_I , поэтому, формально, нужно искать собственные значения матрицы 15×15 , для того, чтобы найти энергию этих состояний. Но известно, что термы обладают определёнными значениями энергии, соответственно, если от произвольного базиса конфигурации перейти к базису с определёнными значениями L, L_z, S, S_z , то матрица станет диагональной. То есть, достаточно вычислить средние значения \hat{H}_I по состояниям с определённым термом. Действительно, L - интеграл движения, гамильтониан - скаляр, а матричные элементы скаляра диагональны по квантовому числу J и M_J . Аналогично S относительно гамильтониана является скаляром:

$$\begin{aligned} [\hat{J}, \hat{H}] &= 0 \\ [\hat{S}, \hat{H}] &= 0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

Следовательно, матричные элементы гамильтониана диагональны по S и S_J :

$$\langle J' M' | S | JM \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (5.31)$$

Вспомним, что

$$\widehat{H}_I = \sum_{k=1}^N \left(-\widehat{V}(r_k) - \frac{Ze^2}{r_k} \right) + \sum_{k < l} \frac{e^2}{r_{kl}} \quad (5.32)$$

Заметим, что в (5.32) член, подчёркнутый одной чертой, не даёт вклад в расщепление терма, а член, подчёркнутый двумя чертами, вносит вклад в разницу между термами. Убедимся в этом. Возьмём старший вектор терма 3P и распишем средние значения (5.32). В общем случае, факторизация волновой функции (разделение её на координатную и спиновую составляющие) не всегда возможно, но в случае двухчастичной функции это зачастую возможно, учитывая это найдём:

$$\begin{aligned} \left\langle L = 1, M_L = 1, S = 1, M_S = 1 \middle| \begin{array}{c} \widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2) \\ \hline \frac{e^2}{r_{12}} \end{array} \middle| L = 1, M_L = 1, S = 1, M_S = 1 \right\rangle = \\ = \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \left\langle \begin{array}{c} \widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2) \\ \hline \frac{e^2}{r_{12}} \end{array} \right| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_2) - \tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_1) \right) \cdot \\ \cdot \left[\begin{array}{c} \widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2) \\ \hline \frac{e^2}{r_{12}} \end{array} \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) - \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \right) \right\rangle \quad (5.33) \end{aligned}$$

Спиновая часть в (5.33) сократилась ввиду отсутствия в ней операторов для спинов.

Формально для каждого оператора в (5.33) 4 слагаемых, но так как $\widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2)$ - симметрична, и интеграл инвариантен относительно замены \bar{x}_1 на \bar{x}_2 , тогда $\tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_2)$ и $-\tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_1)$ в (5.33) дают идентичный вклад, значит можно зачеркнуть одну из них, удвоив другую:

$$(5.33) = \cancel{2} \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \left\langle \begin{array}{c} \widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2) \\ \hline \cancel{\frac{1}{2}} \end{array} \right| \left(\tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_2) - \tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_1) \right) \cdot \\ \cdot \left[\begin{array}{c} \widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2) \\ \hline \frac{e^2}{r_{12}} \end{array} \right] \cdot \cancel{\frac{1}{2}} \left(\tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) - \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \right) = I \quad (5.34)$$

Рассмотрим одночастичное слагаемое $(\widehat{f}(r_1))$. Поскольку $\widehat{f}(r_1)$ зависит только от \bar{x}_1 в (5.34), тогда он не изменит $\tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2)$ в подчёркнутом одной чертой члене, и этот член исчезнет в силу условия ортогональности (5.31). Останется член подчёркнутый двумя чертами, в котором $\tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2)$ пропадёт благодаря условию нормировки. Аналогично с оператором $\widehat{f}(r_2)$.

Таким образом, получим:

$$\widehat{f}(r_1) + \widehat{f}(r_2) \rightarrow \left\langle \tilde{\psi}_{211} \middle| \widehat{f}(r_1) \middle| \tilde{\psi}_{211} \right\rangle + \left\langle \tilde{\psi}_{210} \middle| \widehat{f}(r_2) \middle| \tilde{\psi}_{210} \right\rangle \quad (5.35)$$

Следовательно, одночастичные операторы «не знают» про ПАС волновых функций и дают сумму матричных элементов в одном и другом состояниях. Так как

$$\begin{aligned}\left\langle \tilde{\psi}_{211} \left| \hat{f}(r_1) \right| \tilde{\psi}_{211} \right\rangle &\text{ - зависит от } r_1 \\ \left\langle \tilde{\psi}_{210} \left| \hat{f}(r_2) \right| \tilde{\psi}_{210} \right\rangle &\text{ - зависит от } r_2\end{aligned}$$

значит (5.35) не зависят от терма, а зависят только от радиальной части волновой функции.

Рассмотрим парное взаимодействие: используем в (5.34) оператор $\frac{e^2}{r_{12}}$. В результате получатся кулоновский (K_{10}) и обменный (I_{10}) интегралы, и (5.34) примет вид:

$$I = K_{10} - I_{10}, \quad (5.36)$$

где

$$K_{10} = \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \left| \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_1) \right|^2 \left| \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) \right|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \quad (5.37)$$

с прозрачным физическим смыслом (среднее значение энергии кулоновского отталкивания), а

$$I_{10} = \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \tilde{\psi}_{211}^*(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}^*(\bar{x}_2) \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2) \cdot \frac{e^2}{r_{12}} \quad (5.38)$$

- есть артефакт ПАС волновой функции.

Для терма 1D :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \quad (5.39)$$

можно посчитать среднее значение \hat{H}_I , но сравнить с (5.36) не получится, так как в (5.39) имеется только $\tilde{\psi}_{211}$, а можно сравнить таким образом только функции с одинаковым L_z (в (5.36) $L_z = 1$). Тогда подействуем на предыдущий терм оператором \hat{L}_- :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} \quad (5.40)$$

Волновые функции для 2-х электронов часто можно факторизовать, как и в этом случае, сделаем это:

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow \end{pmatrix} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) | \uparrow \downarrow \rangle - \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2) | \downarrow \uparrow \rangle \right) + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2) | \downarrow \uparrow \rangle - \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) | \uparrow \downarrow \rangle \right) = \\ &= \underbrace{\frac{| \uparrow \downarrow \rangle - | \downarrow \uparrow \rangle}{\sqrt{2}}}_{\text{синглет, а не триплет}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{\tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_2) + \tilde{\psi}_{210}(\bar{x}_1) \tilde{\psi}_{211}(\bar{x}_2)}_{\text{в коорд. части. «+»}} \right) \quad (5.41)\end{aligned}$$

Таким образом, ответ для интересующей части:

$$\frac{e^2}{r_{12}} \rightarrow K_{10} + I_{10} \quad (5.42)$$

Значит, в терме, где $S = 1$ обменный интеграл вычитается из кулоновского, а при $S = 0$ он добавляется. Следовательно, 1-е правило Хунда доказано для этих двух термов.

Обменное взаимодействие

Эти два ответа ((5.36) и (5.42)) можно записать в едином формате:

$$K_{10} + I_{10} \left(1 - \overline{S}^2 \right), \quad (5.43)$$

где $\overline{S}^2 = \overline{S}(\overline{S} + 1)$, где \overline{S} - спин системы. Однако, данный \overline{S}^2 не любой, а относящийся к данной паре электронов. Припишем его через парное взаимодействие:

$$1 - \overline{S}^2 = 1 - \overline{S}_1^2 - \overline{S}_2^2 - 2\overline{S}_1^2\overline{S}_2^2 = 1 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} - 2\overline{S}_1^2\overline{S}_2^2 \quad (5.44)$$

Таким образом, вместо вычисления матричных элементов настоящего кулоновского взаимодействия можно писать эффективный гамильтониан, матричные элементы которого совпадают с матричными элементами настоящего гамильтониана:

$$\hat{K}_{10} + \hat{I}_{10} \left(-\frac{1}{2} - 2\hat{\overline{S}}_1 \hat{\overline{S}}_2 \right) \quad (5.45)$$

Запишем по-другому, пусть

$$- 2\hat{\overline{S}}_1 \hat{\overline{S}}_2 = -\hat{P}_{12}, \quad (5.46)$$

где \hat{P}_{12} - оператор перестановки 2-х спинов, который даёт на триплет «+1», на синглет - «-1». Отсюда возникает понятие обменного взаимодействия (не новая форма взаимодействия, а краткая форма ответа (5.45)).

Эффективный гамильтониан для произвольного числа электронов можно записать в виде суммы (5.45) по всем парам:

$$\sum_{a < b} \left[\hat{K}_{ab} + \hat{I}_{ab} \left(-\frac{1}{2} - 2\hat{\overline{S}}_a \hat{\overline{S}}_b \right) \right] \quad (5.47)$$

Неправильное доказательство 1-го правила Хунда

Пусть в (5.47) все $\hat{I}_{ab} = \hat{I}$ (одинаковы). Запишем $2\hat{\overline{S}}_a \hat{\overline{S}}_b$ через полный спин $\hat{\overline{S}}^2$:

$$\hat{\overline{S}}^2 = \sum_{a=1}^N \hat{\overline{S}}_a^2 + \sum_{a < b} 2\hat{\overline{S}}_a \hat{\overline{S}}_b \quad (5.48)$$

Подставим (5.48) в (5.47):

$$\sum_{a < b} \hat{K}_{ab} - \frac{1}{2} \cdot N \cdot \hat{I} - \hat{I} \hat{\overline{S}}^2 + \hat{I} \cdot \frac{3}{4} \cdot N \quad (5.49)$$

Из (5.49) вытекает 1-е правило Хунда.

Чтобы убедиться, что данные рассуждения неверны, возьмём состояние $2p^3$. Основное состояние соответствует терму 4S :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} \quad (5.50)$$

Сравним его с другим термом (с максимальным L):

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} \quad (5.51)$$

Чтобы посчитать обменный интеграл для (5.50) заметим, что формально получится выражение следующего типа $\langle 6 \text{ слагаемых} | 3 \text{ слагаемых} | 6 \text{ слагаемых} \rangle$, но 3 слагаемых посередине чётны относительно перестановки частиц, а слагаемые по бокам - нечётные. Таким образом, это выражение только из-за этого будет иметь только 18 слагаемых:

$$\left\langle \underbrace{6 \text{ слагаемых}}_1 \middle| 3 \text{ слагаемых} \middle| 6 \text{ слагаемых} \right\rangle \quad (5.52)$$

Учитывая, что в (5.52) оператор $\frac{e^2}{r_{12}}$ не действует на третью частицу, занулим соответствующие слагаемые. Проделав это, получим ответ для данного терма:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{pmatrix} \rightarrow \hat{K}_{10} + \hat{K}_{0-1} + \hat{K}_{-11} - \hat{I}_{10} - \hat{I}_{0-1} - \hat{I}_{-11} \quad (5.53)$$

То есть, все обменные интегралы в (5.53) со знаком «-». Очевидно, что ответы для (5.53) не получится сравнить с ответами для терма (5.51), так как там будут другие квантовые числа. Для сравнения нужен такой же $L_z = 0$ (1 0 -1).

Но для этих 2-х термов 1-е правило Хунда также справедливо.

Лекция 6

Правила Хунда (объяснение)

1-е правило Хунда

Итак, чтобы сравнить термы (5.50) и (5.51), нужно дважды подействовать на второй оператором \hat{L}_- . Проделаем это: первый раз:

$$\begin{aligned} \left| L = 2, M_L = 1, S = \frac{1}{2}, M_S = \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{\hat{L}_-}{\sqrt{(2+2)(2-2+1)}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4}} \left[\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \cancel{\uparrow} & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} \quad (6.1) \end{aligned}$$

и второй раз:

$$\begin{aligned} \left| L = 2, M_L = 0, S = \frac{1}{2}, M_S = \frac{1}{2} \right\rangle &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{2} \cdot \left[0 + \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \right. \\ &\quad \left. + \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + 0 \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{pmatrix} \right] \quad (6.2) \end{aligned}$$

Тогда, высчитывая соответствующий матричный элемент, избавляясь от нулевых слагаемых в силу антисимметричности волновой функции и условия ортогональности, аналогично предыдущему пункту, получаем ответ для второго терма (5.51):

$$K_{10} + K_{0-1} + K_{-11} - I_{1-1} + \frac{1}{2}I_{10} + \frac{1}{2}I_{0-1} \quad (6.3)$$

в то время как для (5.50) имеем:

$$K_{10} + K_{0-1} + K_{-11} - I_{1-1} - I_{10} - I_{0-1} \quad (6.4)$$

Таким образом, сравнивая поправки к энергии (6.3) и (6.4) для этих термов, убеждаемся в справедливости 1-го правила Хунда. Поскольку, количество термов в конфигурации конечно, то это правило Хунда можно доказать подобным образом для каждого терма.

2-е правило Хунда

Рассмотрим частицу пребывающую в состояниях с разными орбитальными моментами: $l = 0; l = 1; l = 2$.

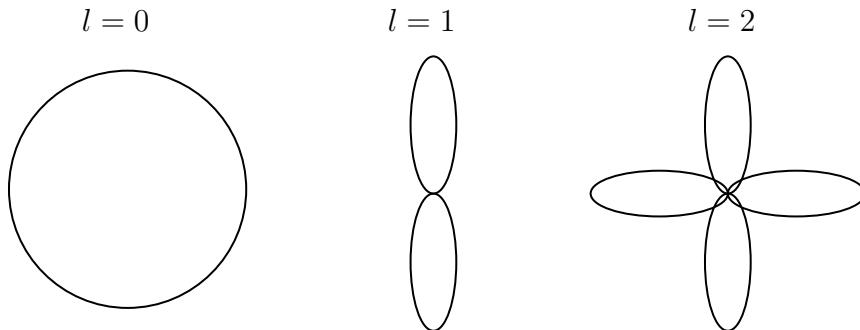


Рис. 6.1. Примерные рисунки одночастичной волновой функции при различных значениях l

Чем больше l , тем быстрее волновая функция осциллирует по углам (См. рис. 6.1). Если взять интеграл для энергии в 3-х мерном пространстве, домножая на квадрат модуля волновой функции, то по лемме Римана интеграл будет больше, где l будет меньше. То же самое работает в отношении к \hat{L} .

Действительно, волновая функция N электронов в 3- N мерном пространстве быстрее осциллирует при большем L .

Таким образом, чем больше L , тем больше осцилляции по углам волновой функции, тем меньше интеграл от парного взаимодействия кулоновского отталкивания, тем меньше добавка к энергии.

Заметим, что зависимость энергии от L значительно слабее, чем от S , поэтому сперва упорядочивание термов происходит по S , а потом по L .

Тонкая структура термов

Тонкое расщепление термов появляется при учёте релятивистских поправок. Запишем соответствующий гамильтониан LS -взаимодействия:

$$\hat{H}_{ls} = \sum_a g(r_a) \cdot \hat{\vec{l}}_a \cdot \hat{\vec{s}}_a \quad (6.5)$$

данный вид интеграла (6.5) вытекает из уравнения Дирака. В нём $g(r_a)$ растёт, положительно и в нулевом приближении является сферически-симметричным.

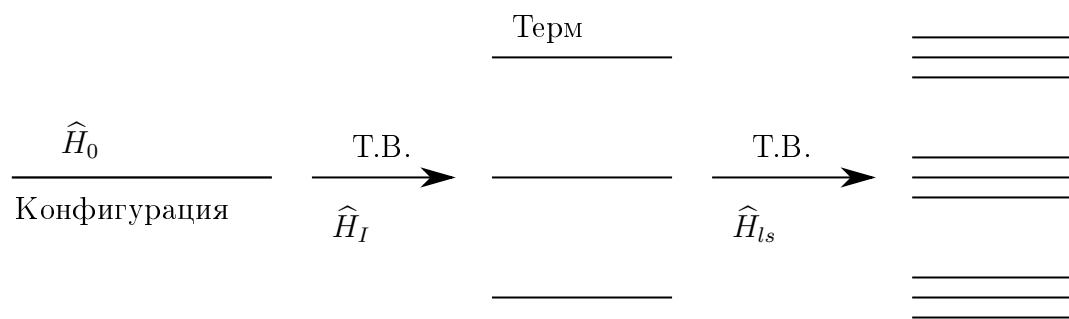


Рис. 6.2. Схема тонкого расщепления при приближении LS -связи

Гамильтониан (6.5) и гамильтониан \hat{H}_I могут соотноситься разными способами:

- 1) « $\widehat{H}_{ls} \ll \widehat{H}_I$ », то есть можно применять теорию возмущений к $\widehat{H}_0 = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_I; \widehat{H}_I = \widehat{H}_{ls}$, такой случай называют приближением *LS*-связи (Рассел Саундеровский) (См. рис. 6.2). Оно справедливо для лёгких атомов: $Z \leq 40$.
- 2) Если « $\widehat{H}_{ls} \sim \widehat{H}_I$ », то теорию возмущений нужно строить для их суммы $(\widehat{H}_I = \widehat{H}_I + \widehat{H}_{ls})$.
- 3) Если « $\widehat{H}_{ls} \gg \widehat{H}_I$ »: *jj*-связь.

Так как случаи 2) и 3) не существуют в таком чистом виде, как случай 1), то не будем их рассматривать, а остановимся на случае 1).

Убедимся, что гамильтониан $\widehat{H}_{ls} = \sum g(r_a) \widehat{l}_a \widehat{s}_a$, можно заменить на $A \widehat{L} \cdot \widehat{S}$ в приближении *ls*-связи.

Теорема

Если в приближении *LS*-связи данный уровень расщепляется *LS*-взаимодействием, то для матричного элемента справедливо:

$$\langle LSM'_L M'_S | \widehat{H}_{ls} | LSM_L M_S \rangle = \langle LSM'_L M'_S | A \widehat{L} \cdot \widehat{S} | LSM_L M_S \rangle \quad (6.6)$$

Докажем её. Вспомним, что если

$$[\widehat{J}, \widehat{S}] = 0, \quad (6.7)$$

то \widehat{S} - скаляр относительно \widehat{J} , если \widehat{S} коммутирует со всеми компонентами \widehat{J} . А для матричных элементов скалярного оператора верно:

$$\langle J' M' | \widehat{S} | JM \rangle = \delta_{JJ'} \cdot \delta_{MM'} \cdot S(J) \quad (6.8)$$

В то время как натурально векторный оператор:

$$[\widehat{J}_n, \widehat{V}_j] = i\epsilon_{njk} \widehat{V}_k \quad (6.9)$$

Вспомним частный случай теоремы Вигнера-Эккарта:

$$\langle JM' | \widehat{V}_i | JM \rangle = c \cdot \langle JM' | \widehat{J}_i | JM \rangle, \quad (6.10)$$

где

$$c = \frac{\langle JM'' | \widehat{J} \cdot \widehat{V} | JM'' \rangle}{J(J+1)} - \text{Не зависит от } M'' \quad (6.11)$$

Выясним, как отдельные части \widehat{H}_{ls} соотносятся с различными моментами:

- 1) $[\widehat{S}, g(r_a) \widehat{l}_a] = 0,$ (6.12)

то есть $g(r_a) \widehat{l}_a$ - скаляр относительно \widehat{S} .

2)

$$\left[\widehat{S}_i, \widehat{s}_j^{(2)} \right] = \left[\cancel{\widehat{s}_i^{(1)}} + \widehat{s}_i^{(2)} + \cancel{\widehat{s}_i^{(3)}} + \cancel{\widehat{s}_j^{(2)}}, \widehat{s}_j^{(2)} \right] = i\epsilon_{ijk} \widehat{s}_k^{(2)} \quad (6.13)$$

Оператор спина каждой отдельной частицы суть вектор относительно полного спина.

3)

$$\left[\widehat{\underline{L}}, \widehat{\underline{S}}_a \right] = 0 \quad (6.14)$$

Каждая компонента спина каждого электрона - скаляр относительно $\widehat{\underline{L}}$.

4)

$$\left[\widehat{L}_i, g(r_2) \widehat{l}_j^{(2)} \right] = i\epsilon_{ijk} g(r_2) \widehat{l}_k^{(2)} \quad (6.15)$$

Значит, $g(r_2) \widehat{l}_j^{(2)}$ является скаляром относительно орбитального момента.

Посчитаем в пределах терма матричный элемент:

$$\sum_a \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a \cdot \widehat{\underline{S}}_a | LSM_L M_S \rangle \quad (6.16)$$

Вспомним, что

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad (6.17)$$

Тогда применим (6.17) к (6.16) по $|L''S''M''_L M''_S\rangle$:

$$\begin{aligned} & \sum_a \sum_{L''S''} \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a | L''S''M''_L M''_S \rangle \cdot \\ & \quad \cdot \langle L''S''M''_L M''_S | \widehat{\underline{S}}_a | LSM_L M_S \rangle = \left[(6.14) \rightarrow \widehat{\underline{S}}_a \sim \delta_{L''L} \right] = \\ & = \sum_a \sum_{S''} \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a | L''S''M''_L M''_S \rangle \cdot \\ & \quad \cdot \langle LS''M''_L M''_S | \widehat{\underline{S}}_a | LSM_L M_S \rangle = \left[(6.12) \rightarrow g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a \sim \delta_{SS''} \right] = \\ & = \sum_a \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a | LSM''_L M''_S \rangle \langle LSM''_L M''_S | \widehat{\underline{S}}_a | LSM_L M_S \rangle \quad (6.18) \end{aligned}$$

Так как $\widehat{\underline{S}}_a$ - вектор относительно $\widehat{\underline{S}}$, то:

$$\begin{aligned} & \sum_a \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a | LSM''_L M''_S \rangle \cdot \langle LSM''_L M''_S | \widehat{\underline{S}}_a | LSM_L M_S \rangle = \\ & = \sum_a \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \widehat{\underline{L}}_a | LSM''_L M''_S \rangle \cdot \langle LSM''_L M''_S | \widehat{\underline{S}} | LSM_L M_S \rangle \cdot c'_a \quad (6.19) \end{aligned}$$

Аналогично для 1-го матричного элемента в (6.19) относительно L :

$$\begin{aligned} \sum_a \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | g(r_a) \hat{l}_a | LSM''_L M''_S \rangle \cdot \langle LSM''_L M''_S | \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle \cdot c'_a = \\ = \sum_a \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} | LSM''_L M''_S \rangle \langle LSM''_L M''_S | \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle \cdot c'_a \cdot c''_a \quad (6.20) \end{aligned}$$

Так как $\hat{\bar{L}}$ - скаляр относительно S ($\hat{\bar{L}} \rightarrow \delta_{SS'}$), то в (6.20) можно восстановить сумму по S' :

$$\begin{aligned} \sum_a \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} | LSM''_L M''_S \rangle \langle LSM''_L M''_S | \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle \cdot c'_a \cdot c''_a = \\ = \sum_a \sum_{S''} \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} | LS'' M''_L M''_S \rangle \langle LS'' M''_L M''_S | \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle c'_a c''_a \quad (6.21) \end{aligned}$$

Аналогично по L'' ($\hat{\bar{S}} \rightarrow \delta_{LL''}$). Тогда, учитывая (6.17) из (6.21) получим:

$$\begin{aligned} \sum_a \sum_{S''} \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} | LS'' M''_L M''_S \rangle \langle LS'' M''_L M''_S | \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle c'_a c''_a = \\ \sum_a \sum_{L'' S''} \sum_{M''_L M''_S} \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} | L'' S'' M''_L M''_S \rangle \langle L'' S'' M''_L M''_S | \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle c'_a c''_a = \\ = \sum_a \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} \cdot \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle c'_a c''_a \quad (6.22) \end{aligned}$$

Пусть

$$A = \sum_a c'_a c''_a \quad (6.23)$$

Тогда из (6.22) получим:

$$\sum_a \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} \cdot \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle c'_a c''_a = A \cdot \langle LSM'_L M'_S | \hat{\bar{L}} \cdot \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle \quad (6.24)$$

Таким образом, мы получили, что в приближении LS -связи для матричного элемента справедливо:

$$\langle LSM'_L M'_S | \hat{H}_{ls} | LSM_L M_S \rangle = \langle LSM'_L M'_S | \hat{A} \hat{\bar{L}} \cdot \hat{\bar{S}} | LSM_L M_S \rangle, \quad (6.25)$$

что и требовалось доказать.

Перейдём в базис с фиксированным полным моментом:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}: |LSJM_J\rangle \quad (6.26)$$

В этом базисе матричные элементы эффективного гамильтониана становятся диагональными. Тогда получим из (6.24):

$$\begin{aligned} \langle LSJ'M'_J | \frac{1}{2} \left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2 \right) | LSJM_J \rangle &= \\ &= \left\langle LSJ'M'_J \underbrace{\left| \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \right|}_{\text{Число}} LSJM_J \right\rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow \langle LSJ'M'_J | \hat{H}_{ls} | LSJM_J \rangle &= \frac{A}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \delta_{JJ'} \delta_{M_J M'_J} \quad (6.27) \end{aligned}$$

То есть, (6.27) - диагональный элемент, а следовательно - поправка к уровню энергии. Заметим, что поскольку в пределах терма L и S не меняются, то к расщеплению приводит слагаемое $J(J+1)$ (См. рис. 6.3).

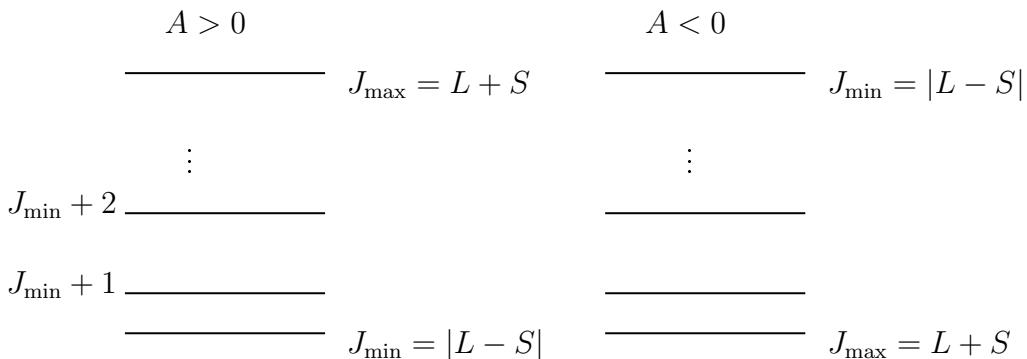


Рис. 6.3. Расщепление терма на тонкую структуру

Заметим, что

$$E_J - E_{J-1} = \frac{A}{2} [J(J+1) - (J-1) \cdot J] = AJ \quad (6.28)$$

То есть расстояние между уровнями растёт линейно (правило интервалов Ландэ) (См. рис. 6.4).

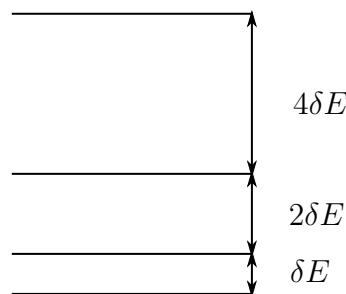


Рис. 6.4. Схематическое изображение правила интервалов Ландэ

Чтобы определить знак постоянной A , нужно воспользоваться 3-м правилом Хунда.

3-е правило Хунда

Пусть дана конфигурация: nl^k . Тогда

- 1) Если $k \leq 2l + 1$, то $A > 0$;
- 2) Если $k \geq 2l + 1$, то $A < 0$.

Доказательство

Рассчитаем матричный элемент гамильтониана для старшего вектора:

$$\langle L, S, M_L = L, M_S = S | \widehat{\vec{L}} \cdot \widehat{\vec{S}} | L, S, M_L = L, M_S = S \rangle \quad (6.29)$$

Так как

$$\widehat{\vec{L}} \cdot \widehat{\vec{S}} = \widehat{L}_z \widehat{S}_z + \frac{1}{2} \widehat{L}_+ \widehat{S}_- + \frac{1}{2} \widehat{S}_- \widehat{L}_+, \quad (6.30)$$

то при действии $\widehat{\vec{L}} \cdot \widehat{\vec{S}}$ на (6.29) оператор \widehat{L}_z даст L ; \widehat{S}_z - даст S , а остальные $(\widehat{L}_+; \widehat{S}_-)$ дадут нули, поскольку матрица (6.29) имеет диагональный вид, а $\widehat{L}_+, \widehat{S}_-$ сдвигают M_L, M_S , то есть сдвигают элемент с диагонали, делая его нулевым.

Лекция 7

Тонкая структура термов

3-е правило Хунда

Итак, \hat{H}_{ls} можно заменить эффективным гамильтонианом $\hat{H}_{\text{eff}} = A \cdot \hat{\bar{L}} \cdot \hat{\bar{S}}$, который диагонален в базисе $|LSJM_J\rangle$. Нужен знак « A ». Все матричные элементы \hat{H}_{eff} в пределах терма совпадают с матричными элементами \hat{H}_{ls} .

Из предыдущей лекции известно, что

$$\hat{\bar{L}} \hat{\bar{S}} = \hat{L}_z \hat{S}_z + \frac{1}{2} \cancel{\hat{L}_+ \hat{S}_-} + \frac{1}{2} h \hbar \hat{L}_- \cancel{\hat{S}_+} \quad (7.1)$$

и тогда, так как $\hat{L}_z \rightarrow L, \hat{S}_z \rightarrow S$,

$$\langle L, S, M_L = L, M_S = S | A \hat{\bar{L}} \hat{\bar{S}} | L, S, M_L = L, M_S = S \rangle = A \cdot L \cdot S \quad (7.2)$$

Из (7.2) следует, что знак матричного элемента зависит от знака A . Найдём такой же матричный элемент для \hat{H}_{ls} :

$$\begin{aligned} \langle L, S, M_L = L, M_S = S | \sum_{a=1}^K g(r_a) \left[\hat{l}_z^{(a)} \hat{s}_z^{(a)} + \frac{1}{2} \cancel{\hat{l}_+^{(a)} \hat{s}_-^{(a)}} + \frac{1}{2} \cancel{\hat{l}_-^{(a)} \hat{s}_+^{(a)}} \right] \cdot \\ \cdot | L, S, M_L = L, M_S = S \rangle \end{aligned} \quad (7.3)$$

Поскольку $\hat{l}_\pm^{(a)}$ изменяет m_l , то он изменяет и M_L , а мы считаем диагональный матричный элемент, следовательно, этот оператор в результате не даёт вклад в соответствующий элемент, аналогично для $\hat{s}_\pm^{(a)}$; тогда рассмотрим действие оставшихся операторов на конфигурацию nl^K

1) $K < 2l + 1$, тогда волновая функция старшего вектора:

$$\begin{pmatrix} l & l-1 & l-2 & \dots & l-K+1 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow \end{pmatrix} \quad (7.4)$$

Обозначим интегралы от $g(r_a)$ константами c . О них известно, что $c > 0$. По (7.4) видно, что

$$S = \frac{1}{2}K; \quad L = \sum_{a=1}^K (l - a + 1) \quad (7.5)$$

С учётом (7.5) элемент (7.3) для (7.4) будет

$$\sum_{a=1}^K c(l - a + 1) \cdot \frac{1}{2} = \underbrace{\frac{1}{2} c}_{>0} \cdot L = \underbrace{A}_{>0} \cdot L \cdot S \quad (7.6)$$

то есть, при $K < 2l + 1$: $A > 0$, следовательно, основное состояние терма соответствует J_{\min} .

2) $K > 2l + 1$, тогда волновая функция старшего вектора:

$$\left(\begin{array}{ccccccccc} l & l-1 & \dots & -l & l & l-1 & \dots & l-K+1 \\ \uparrow & \uparrow & \dots & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \dots & \downarrow \\ 2l+1 & & & & K'=K-(2l+1) & & & \end{array} \right) \quad (7.7)$$

Для (7.7) будет:

$$S = \frac{1}{2}(2l+1) - \frac{1}{2}K'; \quad L = \sum_{a=1}^{K'} (l-a+1) \quad (7.8)$$

Аналогично предыдущему пункту посчитаем соответствующий матричный элемент:

$$\underbrace{\sum_{a=1}^{2l+1} c \frac{1}{2}(l-a+1)}_{=0} + \sum_{a=1}^{K'} s \left(-\frac{1}{2} \right) (l-a+1) = -\frac{1}{2} \underbrace{c}_{>0} L = \underbrace{A}_{<0} \cdot L \cdot S \quad (7.9)$$

То есть, при $K > 2l + 1$: $A < 0$, и основное состояние соответствует J_{\max} .

Таким образом, 3-е правило Хунда доказано.

Многоэлектронный атом в слабых полях

Лёгкий атом в магнитном поле

Рассмотрим лёгкий атом в однородном магнитном поле направленном вдоль оси z . Часть гамильтонiana, связанная с вкладом внешнего магнитного поля:

$$\hat{H}_H = \sum_{a=1}^K -\mu_0 \hat{l}_z^{(a)} H_z - 2\mu_0 \hat{s}_z^{(a)} H_z = -\mu_0 \hat{L}_z H_z - 2\mu_0 \hat{S}_z H_z \quad (7.10)$$

Будем считать, что (7.10) не разрушает структуру терма. Тогда в зависимости от величины поля H_z , \hat{H}_H может разрушать тонкую структуру терма или нет (См. рис. 7.1).

Возможны 3 ситуации:

- 1) « $\hat{H}_H \ll \hat{H}_{ls}$ » \Rightarrow применима теория возмущений с гамильтонианом \hat{H}_H .
- 2) « $\hat{H}_H \sim \hat{H}_{ls}$ » - среднее поле (в общем виде задача не решается).
- 3) « $\hat{H}_H \gg \hat{H}_{ls}$ » - сильное поле (сначала термы расщепляются Зеемановским образом, потом считается поправка ls -взаимодействия).

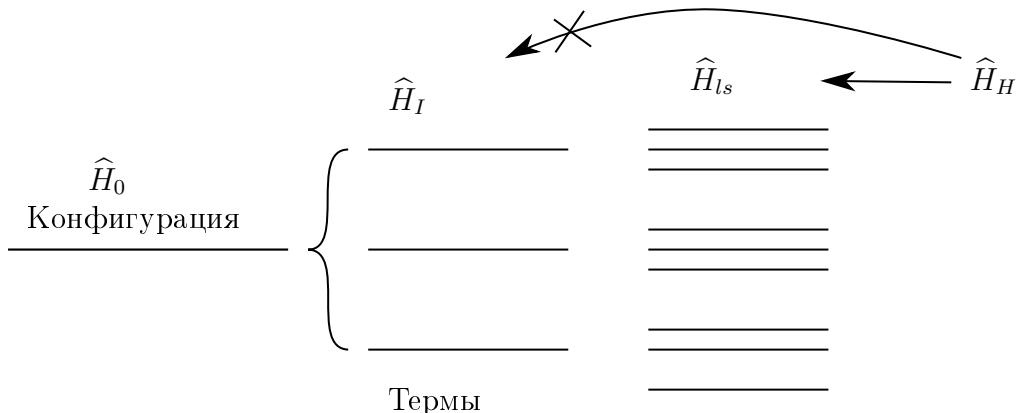


Рис. 7.1. Расщепление уровней многоэлектронного атома под действием магнитного поля

Будем рассматривать 1-й и 3-й варианты.

1) Поскольку сохраняется тонкая структура термов, будем работать в базисе $|LSJM_J\rangle$. Применим теорию возмущений с гамильтонианом

$$\hat{H}_H = -\mu_0 \hat{L}_z H_z - 2\mu_0 \hat{S}_z H_z = -\mu_0 \hat{J}_z H_z - \mu_0 \hat{S}_z H_z \quad (7.11)$$

Заметим, что уровень вырожден: $M_J = -J, \dots, J$, тогда вычислим 1-е слагаемое:

$$\langle LSJM'_J | -\mu_0 \hat{J}_z H_z | LSJM_J \rangle = -\mu_0 M_J H_z \delta_{M'_J M_J} \quad (7.12)$$

Нужно вычислить 2-е менее тривиальное слагаемое:

$$\langle LSJM'_J | -\mu_0 \hat{S}_z H_z | LSJM_J \rangle \quad (7.13)$$

Неправильный метод его вычисления:

Рассмотрим два произвольных вектора (См. рис. 7.2).

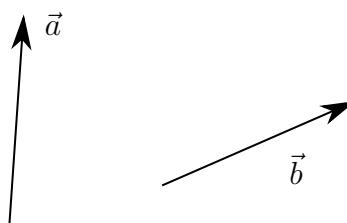


Рис. 7.2. Два произвольных вектора: \vec{a} и \vec{b}

«Очевидно», что

$$\vec{a} = c\vec{b} \Rightarrow \vec{a}\vec{b} = c\vec{b}^2 \Rightarrow c = \frac{\vec{a}\vec{b}}{\vec{b}^2} \Rightarrow \vec{a} = \frac{\vec{a}\vec{b}}{\vec{b}^2} \vec{b} \quad (7.14)$$

Отсюда «можно» вычислить соответствующие поправки к энергии. Однако в нашем случае под вектором \vec{b} подразумевается \hat{J} , а в спектре оператора \hat{J}^2 есть нули, соответственно данный метод не подходит.

Правильный метод вычисления (7.13).

\widehat{S} относительно \widehat{J} является вектором:

$$[\widehat{J}_n, \widehat{S}_j] = [\widehat{L}_n + \widehat{S}_n, \widehat{S}_j] = i\epsilon_{njk}\widehat{S}_k \quad (7.15)$$

По теореме Вигнера-Эккарта для векторного оператора \widehat{V} справедливо:

$$\langle JM'|\widehat{V}_i|JM\rangle = \frac{\langle JM''|\widehat{J} \cdot \widehat{V}|JM''\rangle}{J(J+1)} \cdot \langle JM'|\widehat{J}_i|JM\rangle \quad (7.16)$$

Заметим, что

$$\widehat{J} \cdot \widehat{S} = (\widehat{L} + \widehat{S}) \cdot \widehat{S} = \widehat{S}^2 + \frac{1}{2} \left(\underbrace{(\widehat{L} + \widehat{S})^2}_{\widehat{J}^2} - \widehat{L}^2 - \widehat{S}^2 \right) \quad (7.17)$$

Тогда, учитывая (7.16) и (7.17), получим для (7.13):

$$\begin{aligned} \langle LSJM'_J|-\mu_0\widehat{S}_z H_z|LSJM_J\rangle &= \mu_0 H_z \frac{\frac{1}{2}J(J+1) - \frac{1}{2}L(L+1) + \frac{1}{2}S(S+1)}{J(J+1)} \cdot \\ &\quad \underbrace{\langle LSJM'_J|\widehat{J}_z|LSJM_J\rangle}_{M_J \delta_{M'_J M_J}} \end{aligned} \quad (7.18)$$

То есть, из (7.12), (7.18) видим, что эти матричные элементы - диагональны, а для диагональных матриц диагональные матричные элементы являются собственными значениями. Значит, из (7.12), (7.18) поправка к энергии есть:

$$-\mu_0 H_z \cdot M_J \underbrace{\left(1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}\right)}_{\text{фактор Ланда}} \quad (7.19)$$

Таким образом, мы видим, что в слабом магнитном поле полностью снимается вырождение уровней энергии у многоэлектронного атома (См. рис. 7.3).

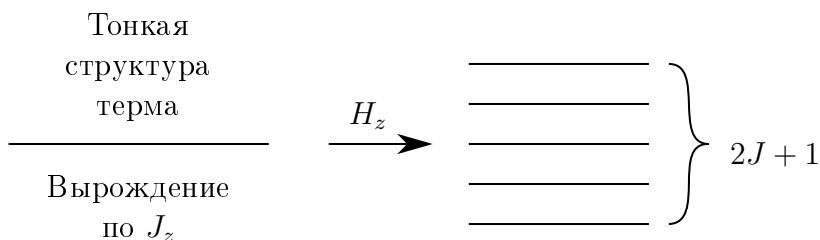


Рис. 7.3. Снятие вырождения у многоэлектронного атома в слабом магнитном поле

3) Рассмотрим случай сильного поля, которое разрушает тонкую структуру терма.

Тогда квантового числа J - нет, и мы работаем в базисе $|LSM_L M_S\rangle$, где термы вырождены с кратностью вырождения $(2L+1)(2S+1)$.

Формально теперь можно учесть расщепление терма под действием магнитного поля:

$$\begin{aligned} \langle LSM'_L M'_S | -\mu_0 \hat{L}_z H_z - 2\mu_0 \hat{S}_z H_z | LSM_L M_S \rangle = \\ = \delta_{M'_L M_L} \delta_{M'_S M_S} (-\mu_0 M_L H_z - 2\mu_0 M_s H_z) \end{aligned} \quad (7.20)$$

В силу диагональности (7.20) является поправкой к энергии, связанной с действием магнитного поля.

Осталось учесть ls -взаимодействие. Для уровней энергии (7.20) применим теорию возмущений с \hat{H}_{ls} . В пределах терма, как мы выяснили, можно произвести замену

$$\hat{H}_{ls} \rightarrow A \cdot \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} \quad (7.21)$$

На самом деле (7.20) полностью не снимает вырождения, так как могут оказаться два различных состояния, у которых будет одинаково $M_L + 2M_S$. Тогда такие уровни будут вырождены. То есть, нужно вычислять матрицу, но меньшей размерности, чем кратность вырождения терма:

$$\langle LSM'_L M'_S | A \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | LSM_L M_S \rangle, \quad (7.22)$$

где выполняется равенство:

$$M'_L + 2M'_S = M_L + 2M_S \quad (7.23)$$

Вспомним, что

$$A \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = A \underbrace{\hat{L}_z}_{M_L} \underbrace{\hat{S}_z}_{M_S} + \frac{1}{2} A \hat{L}_+ \hat{S}_- + \frac{1}{2} A \hat{L}_- \hat{S}_+ \quad (7.24)$$

На этот раз $\hat{L}_\pm \hat{S}_\pm$ не зануляются автоматически, поскольку мы рассматриваем не только диагональные элементы. Однако они всё равно зануляются, поскольку в результате изменяют энергию. Например, в результате $\hat{L}_+ \hat{S}_-$ получим, что ненулевой (7.22) будет, если

$$\begin{aligned} M'_L &= M_L + 1 \\ M'_S &= M_S - 1, \end{aligned} \quad (7.25)$$

но

$$M'_L + 2M'_S = M_L + 2M_S - 1 \neq M_L + 2M_S \quad (7.26)$$

То есть $\hat{L}_+ \hat{S}_-$ меняет энергию, значит не вносит вклад в данный уровень. Аналогично для $\hat{L}_- \hat{S}_+$. С учётом этого (7.24) примет вид:

$$A \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} = A \underbrace{\hat{L}_z}_{M_L} \underbrace{\hat{S}_z}_{M_S} + \frac{1}{2} A \cancel{\hat{L}_+ \hat{S}_-} + \frac{1}{2} A \cancel{\hat{L}_- \hat{S}_+} \quad (7.27)$$

Тогда, с учётом (7.27), (7.22) примет вид:

$$\langle LSM'_L M'_S | A \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{S}} | LSM_L M_S \rangle = \delta_{M'_L M_L} \delta_{M'_S M_S} \cdot A \cdot M_L \cdot M_S, \quad (7.28)$$

где $A \cdot M_L \cdot M_S$ - поправка, связанная с LS -взаимодействием.

Лёгкий атом в электрическом поле

Рассмотрим атом в однородном электрическом поле направленном вдоль оси z (E_z) (Эффект Штарка).

Будем пользоваться приближением LS -связи и считать, что поле слабое (терм не разрушает, можно пользоваться теорией возмущений). Тогда в пределах данного уровня тонкой структуры терма будем пользоваться базисом $|LSJM_J\rangle$ поскольку L, S, J в нём постоянны.

В водороде эффект Штарка - линейный, а в многоэлектронном атоме - квадратичный.

Вычислим матричный элемент:

$$\langle LSJM'_J | -e \underbrace{\sum_{a=1}^K Z_a \cdot E_z}_{-\hat{D}_z} | LSJM_J \rangle, \quad (7.29)$$

где \hat{D} - полный дипольный момент атома. Так как \hat{D} есть вектор относительно \hat{L} , то

$$[\hat{L}_n, \hat{D}_j] = i\epsilon_{njk}\hat{D}_k \quad (7.30)$$

Из правил отбора компонент векторных операторов (прошлый семестр)

$$\langle J'M' | \hat{V}_z | JM \rangle \quad (7.31)$$

- отличен от нуля тогда и только тогда, когда

$$\begin{cases} M' = M \\ J' = J, J \pm 1 \end{cases}; \quad (7.32)$$

а

$$\langle J'M' | \hat{V}_{x,y} | JM \rangle, \quad (7.33)$$

когда

$$\begin{cases} J' = J, J \pm 1 \\ M' = M \pm 1 \end{cases} \quad (7.34)$$

Поскольку вектор \hat{D} - полярный, то можно воспользоваться инверсией. Рассмотрим матричный элемент:

$$\langle LSJM'_J | \hat{D}_z | LSJM_J \rangle \quad (7.35)$$

реализовав пространственную инверсию (перевернув направление осей), получим:

$$\left\langle \underbrace{LSJM'_J}_{(-1)^L} \middle| \underbrace{\hat{D}_z}_{(-1)} \middle| \underbrace{LSJM_J}_{(-1)^L} \right\rangle = -\langle LSJM'_J | \hat{D}_z | LSJM_J \rangle \quad (7.36)$$

Поскольку интегралы не зависят от пространственной инверсии, то из (7.35) и (7.36) получим

$$\langle LSJM'_J | \hat{D}_z | LSJM_J \rangle = -\langle LSJM'_J | \hat{D}_z | LSJM_J \rangle \Rightarrow \hat{D}_z = -\hat{D}_z \Rightarrow \hat{D}_z = 0 \quad (7.37)$$

То есть, диагональные приведённые матричные элементы равны нулю, следовательно (7.32) (применительно к L) станет:

$$L' = L \pm 1 \quad (7.38)$$

Если считать элемент

$$\left\langle \underbrace{L}_{L \pm 1} S J M'_J \middle| \widehat{D}_z \middle| L S J M_J \right\rangle \quad (7.39)$$

то получится ситуация атома водорода, в котором из-за Кулоновского вырождения есть линейный эффект Штарка (См. рис. 7.4).

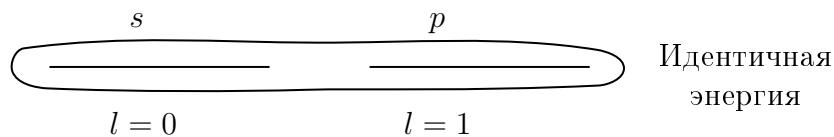


Рис. 7.4. Уровни энергии атома водорода

Но в многоэлектронном атоме не может быть разных L с одинаковой энергией по 2-му правилу Хунда.

Таким образом, в 1-м порядке теории возмущений в многоэлектронном атоме нет эффекта Штарка. Вспомним, что если есть вырожденный уровень, а 1-й порядок теории возмущений не даёт поправки к энергии:

$$\left\langle \psi_{n\alpha}^{(0)} \middle| \widehat{H}_I \middle| \psi_{n\beta}^{(0)} \right\rangle = H_{\alpha\beta}^{(1)}, \quad (7.40)$$

то нужно считать 2-й порядок:

$$H_{\alpha\beta}^{(2)} = \left\langle \psi_{n\alpha}^{(0)} \middle| \widehat{H}_I \sum_{m \neq n} \frac{\left| \psi_m^{(0)} \right\rangle \left\langle \psi_m^{(0)} \right|}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \widehat{H}_I \middle| \psi_{n\beta}^{(0)} \right\rangle \quad (7.41)$$

Вспомним следующее:

- 1) Если $[\widehat{J}, \widehat{S}] = 0$, то \widehat{S} - скаляр, и

$$\langle J'M' | \widehat{S} | LM \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \cdot S(J) \quad (7.42)$$

Тогда спектральное разложение оператора \widehat{S} в этом базисе:

$$\widehat{S} = \sum_J S(J) \sum_M |JM\rangle \langle JM| \quad (7.43)$$

И наоборот, если спектральное разложение оператора есть (7.43), то он скаляр относительно \widehat{J} , и выполняется (7.42).

Можно проверить, что

$$[\widehat{J}_i, \widehat{S}] = 0 \quad (7.44)$$

2) Тензором второго ранга называется конструкция

$$\left[\hat{J}_n, \hat{T}_{nk} \right] = i\epsilon_{njk}\hat{T}_{lk} + i\epsilon_{nkl}\hat{T}_{jl} \quad (7.45)$$

Для тензорного оператора (где \hat{T} - симметричный тензор) верно:

$$\langle JM' | \hat{T}_{ij} | JM \rangle = \delta_{ij}c_1 + c_2 \langle JM' | \hat{J}_i \hat{J}_j + \hat{J}_j \hat{J}_i | JM \rangle, \quad (7.46)$$

где c_1, c_2 - константы относительно M_J .

В нашей задаче:

$$\langle JM' | \hat{T}_{33} | JM \rangle = c_1 + c_2 \underbrace{\langle JM' | 2\hat{J}_z^2 | JM \rangle}_{2\hat{M}_J^2 \delta_{M'_J M_J}} \quad (7.47)$$

3) Знаем что если \hat{A}_i, \hat{B}_j - векторные операторы, то $\hat{A}_i \cdot \hat{B}_j$ - тензор 2-го ранга.

Итак, нужно вычислить элемент:

$$H_{\alpha\beta}^{(2)} = \left\langle LSJ \underbrace{M'_J}_{\alpha} \left| \left(-\hat{D}_z E_z \right) \cdot \sum_{L''S''J''} \frac{1}{E_{LSJ} - E_{L''S''J''}} \cdot \underbrace{\sum_{M''_J} |L''S''J''M''_J\rangle \langle L''S''J''M''_J| \cdot \left(-\hat{D}_z E_z \right)}_{\beta} \right| LSJ \underbrace{M_J}_{\beta} \right\rangle \quad (7.48)$$

Заметим, что подчёркнутый в (7.48) оператор является скаляром относительно \hat{J} . Следовательно, между обкладками в (7.48) - тензор 2-го ранга (его 3-3 компонента). Тогда из (7.47) для (7.48) получим:

$$\langle \dots | \dots | \dots \rangle = c_1 + c_2 \cdot E_z^2 \cdot \delta_{M'_J M_J} \cdot M_J^2 \quad (7.49)$$

Из (7.49) получаем, что эффект Штарка в многоэлектронном атоме - квадратичный, и расстояние между уровнями энергии растёт квадратично с M_J (См. рис. 7.5).

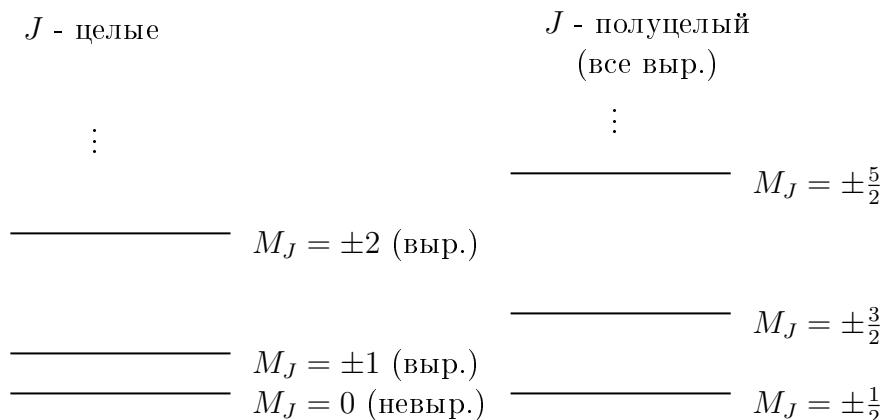


Рис. 7.5. Расщепление на уровни под действием эффекта Штарка в многоэлектронном атоме

Лекция 8

Многоэлектронный атом в слабых полях

Лёгкий атом в электрическом поле

Итак поправка к энергии при квадратичном эффекте Штарка (См. рис. 8.1):

$$\sim (c_1 + c_2 M_J^2) \cdot E^2 \quad (8.1)$$

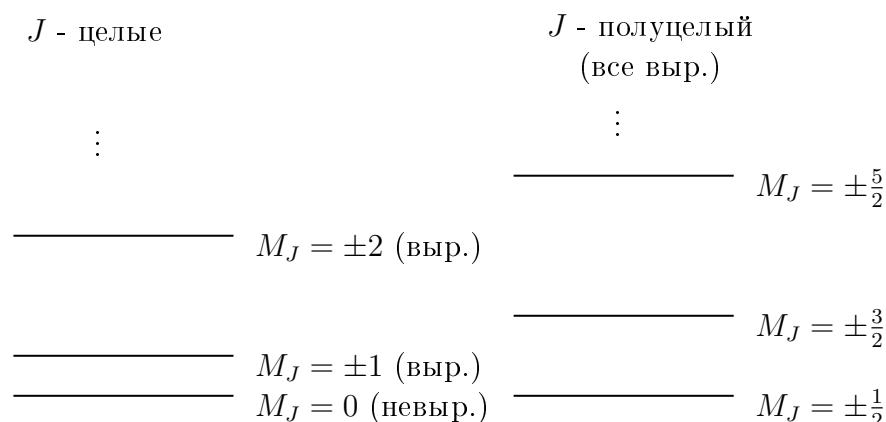


Рис. 8.1. Расщепление на уровни под действием эффекта Штарка в многоэлектронном атоме

Уровни получились вырожденными. Как известно, каждое вырождение уровня соответствует какой-либо симметрии. В случае эффекта Штарка - это симметрия системы относительно отражений в плоскости, перпендикулярной электрическому полю (См. рис. 8.2).

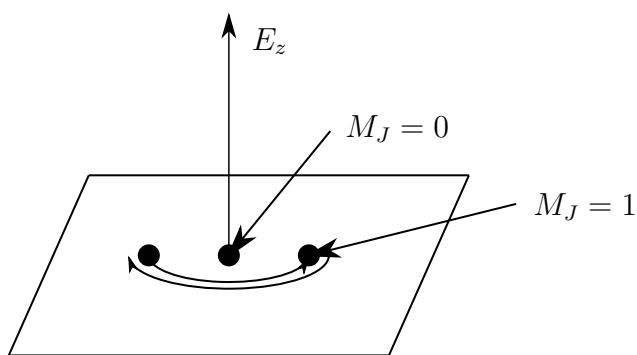


Рис. 8.2. Симметрия, соответствующая вырождению при эффекте Штарка

Очевидно, что $M_J = 0$ находится непосредственно на оси симметрии и переходит само в себя при отражении, поэтому вырождения уровня с $M_J = 0$ не происходит.

При аналогичном построении для магнитного поля (См. рис. 8.3) данных симметрий не происходит, поскольку вектор магнитного поля аксиальный, а не полярный,

и при отражении меняет знак (для магнитного поля расщепление уровней пропорционально $-\mu_0 M_J H_z \cdot g$).

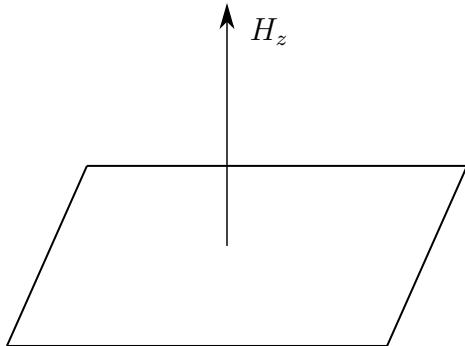


Рис. 8.3. Отсутствие симметрии в многоэлектронном атоме в магнитном поле

Метод Хартри и метод Хартри-Фока

Метод Хартри

Настоящая N -частичная задача с взаимодействием между частицами - это уравнение Шрёдингера в $3N$ -мерном пространстве.

$$\psi(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N) \quad (8.2)$$

Однако её приближённо можно свести к 3-х мерной задаче. Для этого ставится вариационная задача, где в качестве пробной функции N аргументов выступает факторизованная волновая функция:

$$\psi_1(\bar{x}_1) \cdot \psi_2(\bar{x}_2) \cdot \psi_3(\bar{x}_3) \cdots \psi_N(\bar{x}_N) \quad (8.3)$$

Данная функция подставляется в вариационный принцип: ищем экстремум функционала:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \lambda (\langle \psi | \psi \rangle - 1), \quad (8.4)$$

где λ - множитель Лагранжа, который потом окажется энергией.

Как мы знаем, экстремум функционала (8.4) по всему гильбертовому пространству есть решение уравнения Шрёдингера изначальной задачи. Так экстремум (8.4) ищется не по всему пространству, а по его подмножеству, то он является не точным решением уравнения Шрёдингера, а его приближением.

Данный метод называется методом Хартри. Он подходит только для различимых частиц, и применять его к многоэлектронному атому нельзя. Для примера сделаем выкладку для 2-х частиц.

Пусть есть две частицы с различными массами, находящиеся в различных потенциалах, но взаимодействующие между собой. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \hat{V}_1(\bar{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \hat{V}_2(\bar{x}_2) + \hat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \quad (8.5)$$

Функционал (8.4) для такой системы есть

$$\begin{aligned} & \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \psi_1^*(\bar{x}_1) \psi_2^*(\bar{x}_2) \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \widehat{V}_1(\bar{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \widehat{V}_2(\bar{x}_2) + \widehat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \right] \cdot \\ & \quad \cdot \psi_1(\bar{x}_1) \psi_2(\bar{x}_2) - \lambda \langle \psi | \psi \rangle + \lambda = \\ & = \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \psi_1^*(\bar{x}_1) \psi_2^*(\bar{x}_2) \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \widehat{V}_1(\bar{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \widehat{V}_2(\bar{x}_2) + \widehat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) - \lambda \right] \cdot \\ & \quad \cdot \psi_1(\bar{x}_1) \psi_2(\bar{x}_2) + \lambda \end{aligned} \quad (8.6)$$

Подчёркнутую λ имеет смысл рассматривать при варьировании по неё самого функционала, что нужно для выполнения нормировки общей волновой функции. Чтобы этого не делать сразу договоримся, что общая волновая функция уже нормирована на единицу. Договоримся также, что каждая из составляющих общую одночастичных функций ψ_i также нормированы на единицу.

Тогда считаем производную (8.6) по $\psi_1^*(\bar{x}_1)$ и приравняем её нулю:

$$\begin{aligned} & \frac{\delta}{\delta \psi_1^*(\bar{x}_1)} \int \dots \rightarrow 0 \Rightarrow \\ & \Rightarrow \int d\bar{x}_2 \psi_2^*(\bar{x}_2) \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \widehat{V}_1(\bar{x}_1) + \widehat{V}_2(\bar{x}_2) + \widehat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) - \lambda \right] \cdot \psi_1(\bar{x}_1) \psi_2(\bar{x}_2) = 0 \end{aligned} \quad (8.7)$$

Поскольку подчёркнутые в (8.7) слагаемые не зависят от \bar{x}_2 то их можно вынести за знак интеграла. Введём обозначения:

$$\int d\bar{x}_2 \psi_2^*(\bar{x}_2) \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \widehat{V}_2(\bar{x}_2) \right) \psi_2(\bar{x}_2) \equiv E_{22}, \quad (8.8)$$

E_{22} имеет смысл разности энергии 2-й частицы и энергии взаимодействия.

$$\int d\bar{x}_2 \psi_2^*(\bar{x}_2) \widehat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) \psi_2(\bar{x}_2) \equiv V_{22}(\bar{x}_1) \quad (8.9)$$

Тогда с учётом (8.8) и (8.9), из (8.7) получим уравнение Хартри:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 \psi_1(\bar{x}_1) + \widehat{V}_1(\bar{x}_1) \psi_1(\bar{x}_1) - \lambda \psi_1(\bar{x}_1) + E_{22} \psi_1(\bar{x}_1) + V_{22}(\bar{x}_1) \psi_1(\bar{x}_1) = 0 \quad (8.10)$$

Аналогичным образом получается второе уравнение Хартри:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 \psi_2(\bar{x}_2) + \widehat{V}_2(\bar{x}_2) \psi_2(\bar{x}_2) - \lambda \psi_2(\bar{x}_2) + E_{11} \psi_2(\bar{x}_2) + V_{11}(\bar{x}_2) \psi_2(\bar{x}_2) = 0 \quad (8.11)$$

Уравнение Хартри - это уравнение Шрёдингера с причудливым потенциалом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 \psi_1(\bar{x}_1) + \left(\widehat{V}_1(\bar{x}_1) + \underline{\underline{V}_{22}(\bar{x}_1)} \right) \psi_1(\bar{x}_1) + E_{22} \psi_1(\bar{x}_1) = \underbrace{\lambda}_{\text{эн. уровня}} \cdot \psi_1(\bar{x}_1), \quad (8.12)$$

где подчёркнутое одной чертой - энергия первой частицы, подчёркнутое двумя чертами - средняя энергия взаимодействия, таким образом, получаем:

$$\lambda = E_{22} + E_{11} + \langle W \rangle \quad (8.13)$$

Физический смысл V_{22} : если 2-я частица в состоянии $\psi_2(\bar{x}_2)$, то среднее значение потенциала, который она создаёт для 1-й частицы есть V_{22} .

Метод Хартри - приближённый метод, он не учитывает парных корреляций.

Метод Хартри-Фока

Метод Хартри-Фока - это метод Хартри с учётом тождественности частиц. Сделаем соответствующие выкладки для двух частиц.

Тогда пробная волновая функция будет либо иметь нулевой спин (синглет), тогда возможны два варианта координатной части:

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} \psi_1(\bar{x}_1)\psi_1(\bar{x}_2) \\ (\psi_1(\bar{x}_1)\psi_2(\bar{x}_2) + \psi_1(\bar{x}_2)\psi_2(\bar{x}_1)) \frac{1}{\sqrt{2}} \end{array} \right) \quad (8.14)$$

для триплета будут три варианта спиновой части и только один координатной:

$$\left. \begin{array}{c} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right\} (\psi_1(\bar{x}_1)\psi_2(\bar{x}_2) - \psi_1(\bar{x}_2)\psi_2(\bar{x}_1)) \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (8.15)$$

Договоримся, что ψ_1 и ψ_2 - нормированы на единицу и различны (ортогональны). Тогда Выпишем соответствующий функционал (считая спиновый части нормированными на единицу - они сократятся):

$$\int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1^*(\bar{x}_1)\psi_2^*(\bar{x}_2) \pm \psi_1^*(\bar{x}_2)\psi_2^*(\bar{x}_1)) \cdot \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_2) + \hat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) - \lambda \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\bar{x}_1)\psi_2(\bar{x}_1) \pm \psi_1(\bar{x}_2)\psi_2(\bar{x}_1)) \quad (8.16)$$

Поскольку частицы тождественны, то заметим, что $(\psi_1^*(\bar{x}_1)\psi_2^*(\bar{x}_2) \pm \psi_1^*(\bar{x}_2)\psi_2^*(\bar{x}_1))$ инвариантно относительно замены \bar{x}_1 на \bar{x}_2 , как и слагаемое в квадратных скобках, тогда (8.16) примет вид:

$$\begin{aligned} & \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1^*(\bar{x}_1)\psi_2^*(\bar{x}_2) \pm \underbrace{\psi_1^*(\bar{x}_2)\psi_2^*(\bar{x}_1)}_{\cancel{\text{или}}} \right)^2 \cdot \\ & \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_2) + \hat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) - \lambda \right] \cdot \\ & \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\bar{x}_1)\psi_2(\bar{x}_1) \pm \psi_1(\bar{x}_2)\psi_2(\bar{x}_1)) = \\ & = \cancel{\frac{1}{2}} \int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \cancel{\frac{1}{\sqrt{2}}} (\psi_1^*(\bar{x}_1)\psi_2^*(\bar{x}_2)) \cdot \\ & \left[\frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_1) + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_2) + \hat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) - \lambda \right] \cdot \\ & \cdot \cancel{\frac{1}{\sqrt{2}}} \left(\psi_1(\bar{x}_1)\psi_2(\bar{x}_1) \pm \psi_1(\bar{x}_2)\psi_2(\bar{x}_1) \right), \quad (8.17) \end{aligned}$$

где подчёркнутый член в последней строке соответствует уравнению Хартри. Рассмотрим оставшуюся часть соответствующую добавке:

$$\int d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \left(\psi_1^*(\bar{x}_1) \underline{\psi_2^*(\bar{x}_2)} \right) \left[\underline{\frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_1)} + \underline{\frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_2)} + \widehat{W}(\bar{x}_1, \bar{x}_2) - \underline{\lambda} \right] \cdot \left(\pm \underline{\psi_1(\bar{x}_2)} \psi_2(\bar{x}_1) \right), \quad (8.18)$$

где подчёркнутые двумя чертами слагаемые не зависят от \bar{x}_2 , а подчёркнутые одной чертой не дадут вклад в силу дифференцирования по $\psi_1^*(\bar{x}_1)$ и ортогональности функций ψ_1 и ψ_2 .

Введём обозначения:

$$\int d\bar{x}_2 \psi_2^*(\bar{x}_2) \left[\frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \hat{V}(\bar{x}_2) \right] \psi_1(\bar{x}_2) \equiv V_{21}(\bar{x}_1) \quad (8.19)$$

V_{21} отвечает за обменное «взаимодействие» (напомним, что оно не существует в природе, как отдельное взаимодействие, а является артефактом антисимметричности волновых функций относительно перестановок частиц).

Таким образом, получим уравнение Хартри-Фока:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_1 \psi_1(\bar{x}_1) + \hat{V}(\bar{x}_1) \psi_1(\bar{x}_1) + E_{22} \psi_1(\bar{x}_1) + V_{22}(\bar{x}_1) \pm \pm E_{21} \psi_2(\bar{x}_1) \pm V_{21}(\bar{x}_1) \psi_2(\bar{x}_1) = \lambda \psi_1(\bar{x}_1) \quad (8.20)$$

Данное интегродифференциальное уравнение решается итерациями.

Метод Хартри-Фока применим для многоэлектронного атома.

Таблица Менделеева

Рассмотрим упорядочивание химических элементов в таблице Менделеева. Она разделена на периоды, длина строки (коротких периодов) определяется s - и p - электронами:

$$8 = \underbrace{2}_{s} + \underbrace{6}_{p} \quad (8.21)$$

Длинные периоды определяются d -электронами, а лантаноиды и актиноиды: f -электронами.

Однако заполнение подоболочек электронами происходит не в том порядке, в котором записаны элементы в таблице, поскольку орбитальный момент может вносить изменение в энергию превышающую расстояние между двумя соседними электронами (например, $4s$ лежит ниже, чем $4d$).

Примеры иррегуляции (рассмотрим элементы, следующие после которых имеют иррегуляцию в заполнении электронных оболочек):

- 1) $4s^2 3d^3$, следующий после него $4s^1 3d^5$. Это можно объяснить тем, что терм с наимизшей энергией у пяти электронов p -оболочки:

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & -1 & -1 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ 6 & 5 \end{pmatrix} \quad (8.22)$$

можно объяснить данную иррегуляцию тем, что терм нестолько «хочет» заполнить свою p -оболочку спинами в одну сторону, что отнимает электрон у s -оболочки. Однако все иррегуляции так объяснить не получится, они объясняются численным счётом их спектра, чего мы делать не будем. Приведём пример других иррегулярностей:

$$2) \quad 5s^2 4d^2 \rightarrow 5s^1 4d^4 \quad (8.23)$$

$$3) \quad 5s^1 d^5 \rightarrow 5s^2 4d^5 \quad (8.24)$$

$$4) \quad 6s^2 5d^1 \rightarrow 6s^2 4f^2 \quad (8.25)$$

Молекулы

Ион водорода

Рассмотрим ион водорода. Два ядра с зарядом «+1» находятся на расстоянии R друг от друга, рядом с ними находится электрон с зарядом «-1» (См. рис. 8.4).

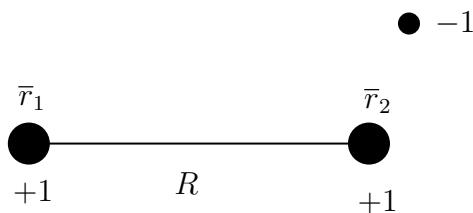


Рис. 8.4. Ион водорода

Точно данная задача не решается. Поэтому для водорода прибегают к адиабатическому приближению (приближению Борна-Аппенгеймера): поскольку ядра порядка в 2000 раз тяжелее электрона, то в приближении считаем их неподвижными, и задача сводится к одночастичной задачи электрона в потенциале этих ядер с параметром R . Решая данную задачу получаем энергию $E(R)$.

Учёт ядер происходит в следующем приближении, решая 2-х частичную задачу в потенциале $E(R)$, что можно делать, поскольку электрон успевает подстроиться под малое смещение ядер. Задача двумерная в силу симметрии вокруг оси, проходящей через центры двух ядер. Примерный вид волновой функции электрона представлен на рис. 8.5.

Приближенно задача решается вариационным методом, где в качестве волновой функции берётся:

$$\psi_{\pm}(\bar{x}) = N [\psi_{100}(\bar{x} - \bar{r}_1) \pm \psi_{100}(\bar{x} - \bar{r}_2)], \quad (8.26)$$

где N - нормировочный множитель; $\psi_{100}(\bar{x} - \bar{r}_1)$ - убывающая экспонента вокруг 1-го ядра; $\psi_{100}(\bar{x} - \bar{r}_2)$ - убывающая экспонента вокруг 2-го ядра.

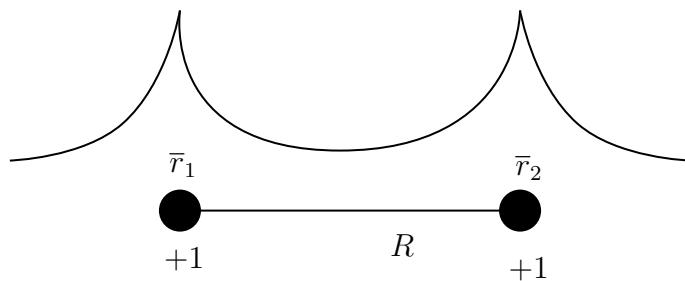


Рис. 8.5. Эскиз волновой функции для иона водорода

Знак в (8.26) можно определить простыми рассуждениями.

Если в (8.26) стоит «+», то область волновая функция будет иметь максимумы у ядер, а в области между ядрами (См. рис. 8.6) волновая функция будет в 2 раза больше чем ψ_{100} , а вероятность нахождения электрона в этой области - в 4 раза, тогда, с точки зрения электродинамики, к заряду «-1» в этой области будут притягиваться ядра, в следствие чего система будет иметь связное состояние.

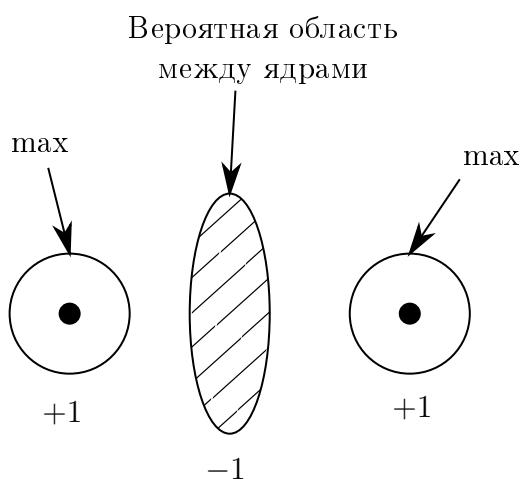


Рис. 8.6. Наличие связного состояния в случае знака «+» в (8.26)

Если в волновой функции (8.26) стоит «-», то вероятность нахождения в этой области между ядрами будет нулевой (См. рис. 8.7).

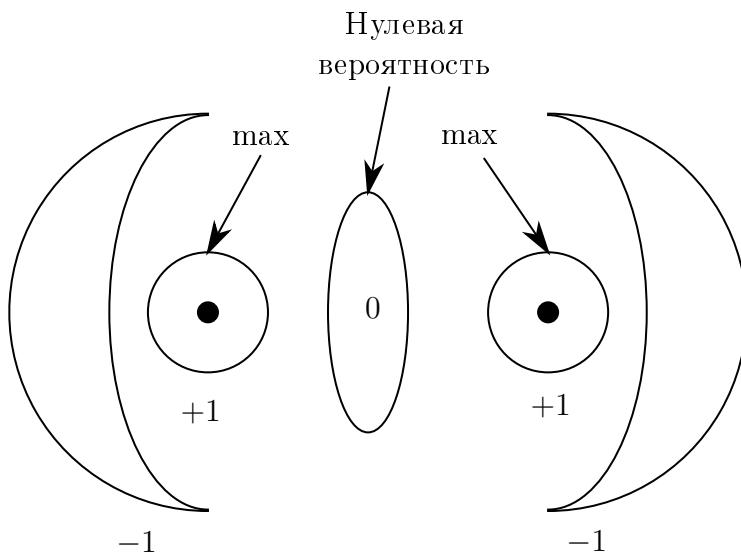


Рис. 8.7. Отсутствие связного состояния у системы в случае «-» в волновой функции

Тогда, электроны будут находиться на периферии системы, и, с точки зрения электродинамики системы походит на систему двух диполей, которые должны отталкиваться друг от друга. Такая система не будет иметь связного состояния.

В результате решения задач для разных R получаем потенциал для волновой функции со знаком «+» (E_+) и со знаком «-» (E_-) (См. рис. 8.8).

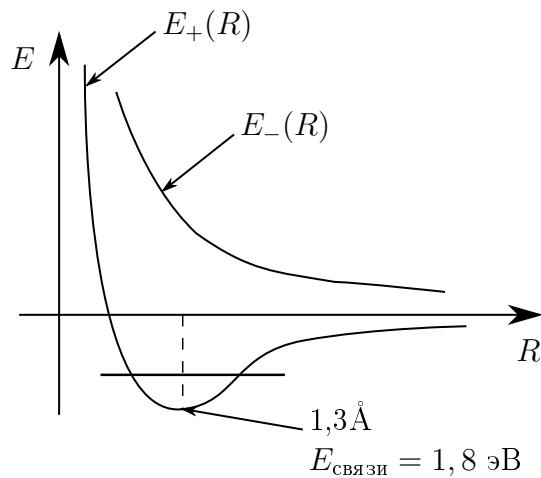


Рис. 8.8. Потенциал для иона водорода для E_+ и E_-

Данный метод даёт положение минимума на $R = 1,8\text{\AA}$, и энергию связи $E_{\text{связи}} = 1,8(\text{эВ})$, в то время как на самом деле: расстояние между ядрами $1,1\text{\AA}$ и энергия связи $E_{\text{связи}} = 2,8(\text{эВ})$. Ядро движется в потенциале, который вблизи минимума в некотором приближении можно считать потенциалом гармонического осциллятора. Тогда ядро совершает колебания, энергия которых $0,1(\text{эВ})$.

Молекула водорода

Пробная функция ψ_+ даёт приближение для иона водорода. Однако пробную волновую функцию не следует искать в виде

$$\psi_+(\bar{x}_1) \psi_+(\bar{x}_2) \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (8.27)$$

поскольку электроны отталкиваются друг от друга, что нужно учитывать (когда 1-й электрон находится над 1-м ядром, 2-й - над вторым). Поэтому пробная волновая функция ищется в виде:

$$\begin{aligned} \psi(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = N & [\psi_{100}(\bar{x}_1 - \bar{r}_1)\psi_{100}(\bar{x}_2 - \bar{r}_2) + \psi_{100}(\bar{x}_1 - \bar{r}_2)\psi_{100}(\bar{x}_2 - \bar{r}_1)] \cdot \\ & \cdot \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (8.28)$$

В результате получится: $R = 0,8\text{\AA}$; $E_{\text{связи}} = 3,2(\text{эВ})$, когда на самом деле: $R = 0,7\text{\AA}$; $E_{\text{связи}} = 4,7(\text{эВ})$. Энергия колебаний: 0,3 (эВ).

Лекция 9

Упругое потенциальное рассеяние

Начнём с постановки задачи. Пусть имеется некоторый потенциал с конечным характерным размером a и каким-то характерным значением V_0 (См. рис. 9.1).



Рис. 9.1. Примерный вид постановки задачи рассеяния

Характерные значение V_0 и размер a потенциала можно ясно определить через потенциал Юкава:

$$g \cdot \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (9.1)$$

откуда

$$a \sim \frac{1}{\mu}; \quad V_0 \sim g\mu \quad (9.2)$$

Формально, требование применимости теории упругого рассеяния для потенциала можно записать, как:

$$\int d\bar{x} \hat{V}^2(\bar{x}) < \infty \quad (9.3)$$

Для потенциалов, удовлетворяющих (9.3) можно ставить задачу упругого рассеяния.

Пример

Рассмотрим потенциал

$$-\frac{A^2}{r^2} \quad (9.4)$$

для него задачи упругого рассеяния ставить нельзя, так как

$$\int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{r^4} \rightarrow \text{расходится} \quad (9.5)$$

из-за падения на центр вероятность, определяемая волновой функцией, не сохраняется, и часть частиц теряется.

Пример

Рассмотрим кулоновский потенциал

$$\frac{e^2}{r} \quad (9.6)$$

для него задачу рассеяния тоже нельзя ставить, так как

$$\int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{r^2} \rightarrow \text{расходится} \quad (9.7)$$

однако, если добавить фотонам, переносчикам взаимодействия некоторую массу (ϵ), то потенциал будет обрезаться до $\frac{1}{\epsilon}$:

$$\frac{e^2}{r} \cdot e^{-\epsilon r}, \quad (9.8)$$

и задачу упругого рассеяния для него можно ставить. Результаты рассеяния будут иметь предел при $\epsilon \rightarrow 0$ (хотя на чистый кулоновский потенциал задачу рассеяния ставить нельзя).

Вспомним одномерную задачу рассеяния (См. рис. 9.2).

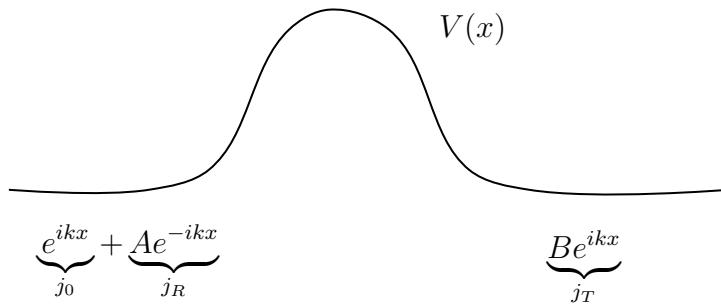


Рис. 9.2. Одномерная задача рассеяния

В одномерной задаче вычислялись потоки вероятности для падающей (j_0), отражённой (j_R) и прошедшей (j_T) частиц, и получались коэффициенты отражения (R) и прохождения (T):

$$\begin{aligned} R &= \frac{j_R}{j_0} \\ T &= \frac{j_T}{j_0} \\ R + T &= 1 \end{aligned} \quad (9.9)$$

Чтобы решить 3-х мерную задачу рассеяния, нужно решить 3-х мерное стационарное уравнение Шрёдингера:

$$e^{i\bar{k}\bar{x}} + \frac{e^{i\bar{k}\bar{r}}}{r} f(\theta, \varphi), \quad (9.10)$$

где $r = |\bar{x}|$, $f(\theta, \varphi)$ - асимптотика решения стационарного уравнения Шрёдингера (амплитуда рассеяния), а \bar{k} - сонаправлен с осью z (См. рис. 9.3).

Дифференциальное сечение рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|j(\theta, \varphi)|}{j_0} \quad (9.11)$$

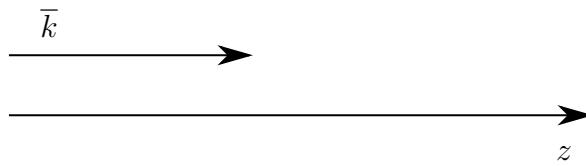


Рис. 9.3. Ориентация вектора \bar{k}

Заметим, что в векторе $\vec{\nabla}$ в сферических координатах на ∞ останется только одна производная:

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \quad (9.12)$$

В задаче рассеяния дифференциальное сечение имеет вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (9.13)$$

Физический смысл дифференциального сечения - количество частиц рассеянных в телесный угол $d\Omega$, если налетающий поток частиц равен 1.

Полное сечение:

$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (9.14)$$

Рассмотрим задачу рассеяния на бесконечно твёрдом шарике (См. рис. 9.4).

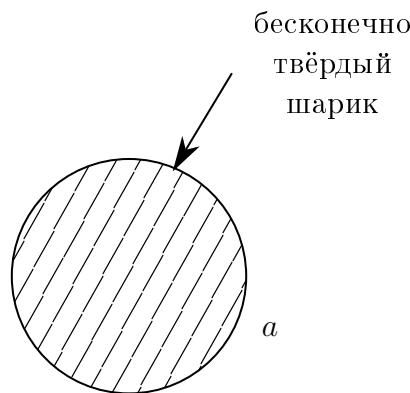


Рис. 9.4. Рассеяние на бесконечно твёрдом шарике

Характерный размер этого шарика можно сравнить с длиной волны де Бройля налетающих частиц: $k : \lambda \sim \frac{1}{k}$. Тогда будем считать частицы быстрыми, если $ka \gg 1$; медленными, если $ka \ll 1$. Для медленных частиц сечение рассеяния получается равным $4\pi a^2$, а для быстрых: $2\pi a^2$. В обоих этих случаях сечение рассеяния получилось значительно больше самого шарика.

Чтобы это объяснить можно привести аналогию из оптики (См. рис. 9.5).

В результате дифракции монохроматической волны за шариком будет светлое пятно, чтобы избежать его появления необходимо отказаться от монохроматичности падающей волны и рассматривать волновой пакет, падающий на шарик. Для волновых пакетов нужно взять суперпозицию по разным длинам волн.

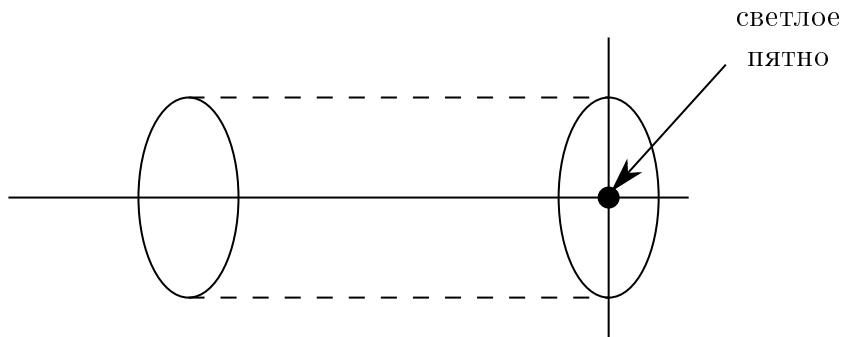


Рис. 9.5. Схема образования пятна Пуассона

В задаче рассеяния речь идёт о большом волновом пакете (размер которого будет, конечно, больше, чем a) частиц с заданной энергией E (то есть, заданном волновом векторе \vec{k}), откуда становится понятно, что имеется «монохроматичность» (См. рис. 9.6).

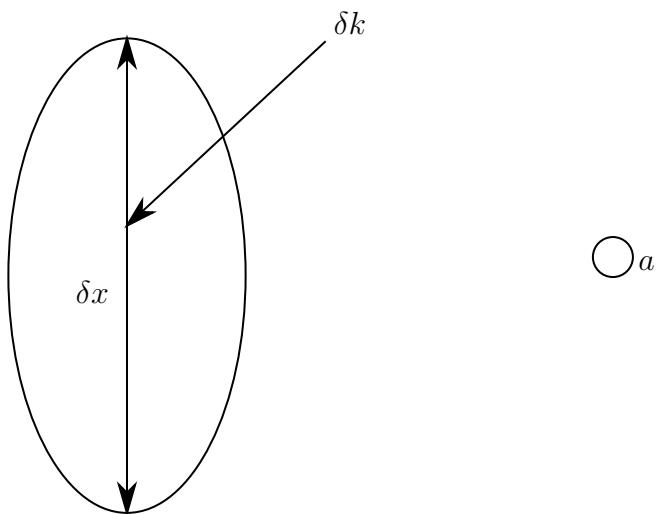


Рис. 9.6. Рассеяние волнового пакета частиц с заданной энергией E на шарике размера a

В связи с этим сечение рассеяния может быть не только больше характерного размера потенциала, но и, при некоторых потенциалах, пропорциональным $\sim \frac{1}{k^2} \sim \frac{1}{E}$, и соответственно оно $\rightarrow \infty$ при $k \rightarrow 0$.

В отсутствии резонанса, при рассеянии волнового пакета также происходит интерференция между волнами (См. рис. 9.7).

Физический смысл такого явления в следующем (См. рис. 9.7): поскольку есть вероятность обнаружить частицу в 1 и 2, то вероятность обнаружения частицы в 3 убудет (оптическая теорема). Таким образом, интерференция между плоской и расходящейся сферической волнами вычитает из пакета 3 все частицы, рассеянные на разные углы.

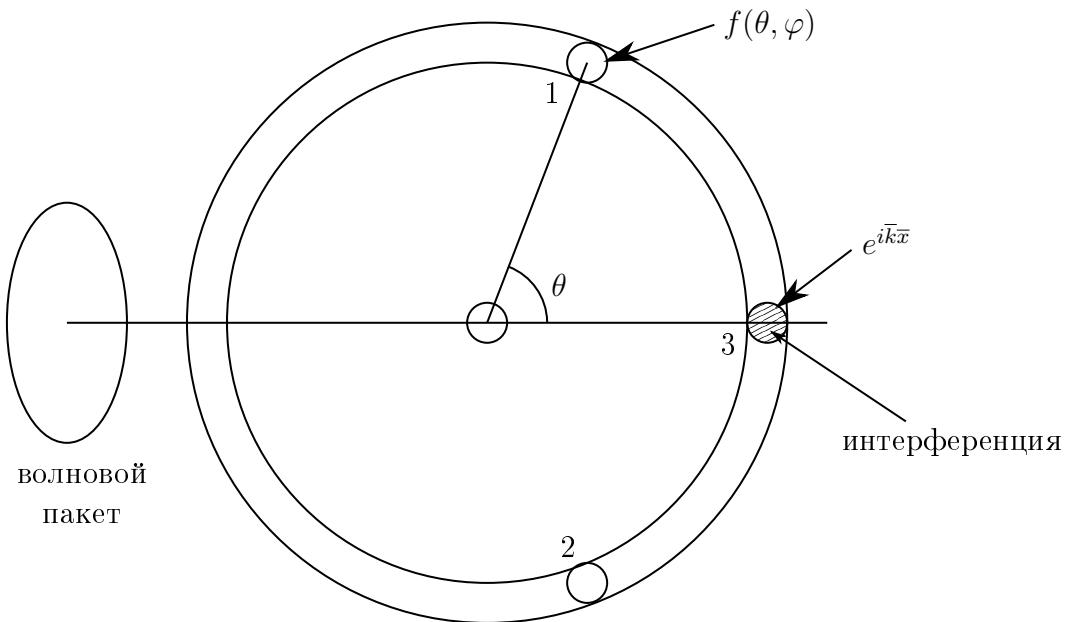


Рис. 9.7. Схема рассеяния волнового пакета на потенциале

Уравнение Липпмана-Швингера

В решении уравнения Шрёдингера есть граничные условия на бесконечности. Данную особенность задачи учитывается в уравнении Липпмана-Швингера (УЛШ). Его решение будет иметь правильные граничные условия и будет решением уравнения Шрёдингера.

Уравнение Липпмана-Швингера имеет вид:

$$\psi(\bar{x}) = \psi_0(\bar{x}) + \int d\bar{y} G_0(\bar{x}, \bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \psi(\bar{y}), \quad (9.15)$$

где

$$\psi_0(\bar{x}) \equiv e^{i\bar{k}\bar{x}}; \quad (9.16)$$

$$G_0(\bar{x}, \bar{y}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\bar{x}-\bar{y}|}}{|\bar{x}-\bar{y}|} \quad (9.17)$$

G_0 - функция Грина для уравнения Гельмгольца:

$$(\Delta + k^2) G_0(\bar{x}, \bar{y}) = \delta(\bar{x} - \bar{y}) \quad (9.18)$$

Из (9.18) видно:

$$G_0(\bar{x}, \bar{y}) = \frac{1}{\Delta + k^2 \pm i\epsilon}, \quad (9.19)$$

где знак в знаменателе определяет сходится или расходится сферическая волна. Тогда

$$\frac{1}{\Delta + k^2 + i\epsilon} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} = \frac{1}{\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} k^2}_{E} - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) + i\epsilon} = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} = \hat{G}_0(E) \quad (9.20)$$

$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

Подставляя (9.20) в (9.15), получим

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \widehat{G}_0(E) \underbrace{\widehat{H}_I}_{\widehat{V}(\bar{x})} |\psi\rangle, \quad (9.21)$$

где $|\psi_0\rangle$ - изначальная плоская волна.

Убедимся, что решение УЛШ удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера. Заметим, что для плоской волны справедливо

$$(\Delta + k^2)e^{i\bar{k}\bar{x}} = 0 \quad (9.22)$$

Домножим (9.15) слева на $(\Delta + k^2)$ тогда

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2)\psi(\bar{x}) &= (\Delta + k^2)\psi_0(\bar{x}) + \int d\bar{y} \underbrace{(\Delta_x + k^2)G_0(\bar{x}, \bar{y})}_{\delta(\bar{x} - \bar{y})} \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\bar{y})\psi(\bar{y}) = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\bar{x})\psi(\bar{x}) \Rightarrow \Delta\psi(\bar{x}) + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2}(E - \widehat{V}(\bar{x}))}_{k^2}\psi(\bar{x}) = 0 \end{aligned} \quad (9.23)$$

Получили стационарное уравнение Шрёдингера.

Помимо УЛШ есть другое полезное уравнение:

$$\psi(\bar{x}) = \psi_0(\bar{x}) + \int d\bar{y} G(\bar{x}, \bar{y}) \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\bar{y}) \cdot \psi_0(\bar{y}), \quad (9.24)$$

где G_0 - функция Грина для уравнения Гельмгольца в присутствии потенциала $\widehat{V}(\bar{x})$:

$$\left[\Delta + k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \widehat{V}(\bar{x}) \right] G(\bar{x}, \bar{y}) = \delta(\bar{x} - \bar{y}) \quad (9.25)$$

В данном курсе оно не рассматривается.

Убедимся в выполнении граничных условий. Так как $\widehat{V}(\bar{y})$ отличен от нуля в a , то интеграл в (9.15) - ограничен размером потенциала a . Заметим, когда $x \rightarrow \infty$ (См. рис. 9.8), то

$$|\bar{x} - \bar{y}| \cong |\bar{x}| - \bar{y} \cdot \frac{\bar{x}}{|\bar{x}|} \quad (9.26)$$

Введём:

$$\bar{k}' \equiv \frac{\bar{x}}{|\bar{x}|} \cdot |\bar{k}|, \quad (9.27)$$

где \bar{k}' - волновой вектор рассеявшейся частицы (Поскольку у падающей и рассеявшейся частиц энергии совпадают, то модули волновых векторов одинаковы).

Итак, имеем

$$|\bar{x} - \bar{y}| \cong r - \bar{k}' \cdot \bar{y} \frac{1}{k}, \quad k = |\bar{k}| \quad (9.28)$$

Тогда, подставляя (9.28) в (9.17), получим

$$G_0(\bar{x}, \bar{y})|_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} = -\frac{1}{4\pi} \cdot \frac{e^{ikr - i\bar{k}'\bar{y}}}{r - \bar{k}' \cdot \bar{y} \cdot \frac{1}{k}} \quad (9.29)$$

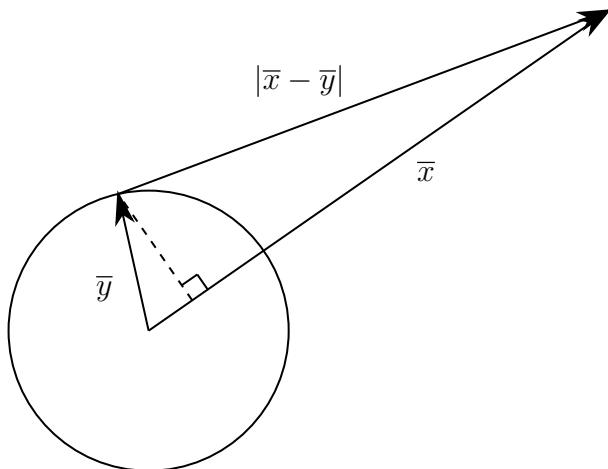


Рис. 9.8. Схема приближения разности векторов на бесконечности

сокращение в знаменателе произошло ввиду малости члена; в показателе экспоненты так сделать нельзя, так как важна конечная фаза, как остаток от деления на 2π :

$$e^{i2\pi \cdot 10^6 + i\pi} \neq e^{i2\pi \cdot 10^6} \quad (9.30)$$

С учётом (9.29), (9.15) на бесконечности примет логичный вид:

$$\psi(\bar{x})|_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} = \underbrace{e^{i\bar{k}\bar{x}}}_{\text{плоская волна}} + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r}}_{\text{сферическая}} \left[-\frac{1}{4\pi} \int d\bar{y} e^{-i\bar{k}'\bar{y}} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \cdot \psi(\bar{y}) \right] \quad (9.31)$$

Решение (9.31) удовлетворяет граничным условиям на бесконечности. Из (9.31) видно, что

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d\bar{x} e^{i\bar{k}'\bar{x}} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{x}) \psi(\bar{x}) \quad (9.32)$$

Борновский ряд

Напомним, что выражения (1.29) для ψ :

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \hat{G}_0 \hat{H}_I |\psi\rangle \quad (9.33)$$

можно подставить в правую часть выражения (то же самое):

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \hat{G}_0 \hat{H}_I |\psi\rangle \quad (9.34)$$

и получить Борновский ряд теории возмущений:

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \hat{G}_0 \hat{H}_I |\psi_0\rangle + \hat{G}_0 \hat{H}_i \hat{G}_0 \hat{H}_I |\psi_0\rangle + \dots \quad (9.35)$$

Проделаем то же самое с УЛШ:

$$\begin{aligned}
 \psi(\bar{x}) &= \psi_0(\bar{x}) + \int d\bar{y} G_0(\bar{x}, \bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \psi(\bar{y}) \Rightarrow \\
 \Rightarrow \psi(\bar{x}) &= \underbrace{\psi_0(\bar{x})}_{0\text{-е приб.}} + \underbrace{\int d\bar{y} G_0(\bar{x}, \bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \psi_0(\bar{y})}_{1\text{-е приб.}} + \\
 &+ \underbrace{\int d\bar{y} G_0(\bar{x}, \bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \int d\bar{z} G_0(\bar{y}, \bar{z}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{z}) \psi_0(\bar{z})}_{2\text{-е приб.}} + \\
 &+ \underbrace{\int d\bar{y} G_0(\bar{x}, \bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \int d\bar{z} G_0(\bar{y}, \bar{z}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{z}) \int d\bar{w} G_0(\bar{z}, \bar{w}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{w}) \psi_0(\bar{w})}_{3\text{-е приб.}} + \\
 &\quad + \dots \quad (9.36)
 \end{aligned}$$

Если потенциал сферически симметричный $V(\bar{x}) = V(r)$, то условие сходимости ряда (9.36):

$$\int_0^\infty r dr |V(r)| < \infty \quad (9.37)$$

Условие применимости данного ряда можно получить из следующих соображений. Поскольку поправка (последующее приближение) должно быть много меньше основного вклада, то, оценив их, получим:

$$\underbrace{e^{i\bar{k}\bar{x}}}_{\sim 1} \gg \int d\bar{y} G_0(\bar{x}, \bar{y}) \frac{2m}{\hbar^2} \hat{V}(\bar{y}) \cdot \underbrace{e^{i\bar{k}\bar{y}}}_{\sim V_0} \Rightarrow 1 \gg a^3 \cdot \frac{1}{a} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \Rightarrow V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \quad (9.38)$$

Выражение (9.38) - это одно из двух альтернативных условий применимости Борновского приближения. Рассмотрим альтернативный вариант.

Пусть $ka \gg 1$, тогда $e^{i\bar{k}\bar{y}}$ - быстро осциллирует. В таком случае интегрирование по \bar{x} и по \bar{y} по прежнему даст a^2 , но интегрирование по z :

$$\int_0^a e^{ikz} dz \sim \frac{e^{ika} - 1}{k} \sim \frac{1}{k} \ll a \quad (9.39)$$

Тогда получим альтернативное условие применимости Борновского приближения:

$$1 \gg a^2 \cdot \frac{1}{k} \cdot \frac{1}{a} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \Rightarrow V_0 \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \cdot k \cdot a \quad (9.40)$$

Найдём амплитуду рассеяния в 1-м Борновском приближении:

$$\begin{aligned}
 f^{(1)}(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{4\pi} \int d\bar{x} e^{-i\bar{k}'\bar{x}} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{x}) \cdot \psi_0(\bar{x}) = \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \int d\bar{x} e^{-i\bar{k}'\bar{x}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{x}) e^{i\bar{k}\bar{x}} = [\bar{k} - \bar{k}' \equiv \bar{q}] \Rightarrow \\
 &\Rightarrow f^{(1)} \equiv -\frac{1}{4\pi} \int d\bar{x} e^{i\bar{q}\bar{x}} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} V(\bar{x}) \quad (9.41)
 \end{aligned}$$

Заметим, что (9.41) представляет собой преобразование Фурье для потенциала $V(\bar{x})$. В таком случае, если

$$V(\bar{x}) \xrightarrow{\text{уменьшить}} f_V^{(1)} \quad (9.42)$$

и при этом

$$W(\bar{x}) \equiv \int d\bar{y} \rho(\bar{y}) V(\bar{x} - \bar{y}), \quad (9.43)$$

тогда

$$f_W^{(1)} = f_V^{(1)} \cdot F; \quad (9.44)$$

где F - формфактор.

Лекция 10

Борновский ряд

Итак если рассеяние на потенциале V в первом приближении

$$f^{(1)} = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (10.1)$$

то на потенциале

$$W(\vec{x}) = \int d\vec{y} \rho(\vec{y}) V(\vec{x} - \vec{y}), \quad (10.2)$$

где ρ - плотность центров рассеяния в первом приближении будет

$$f_W^{(1)} = f_V^{(1)} \cdot F, \quad (10.3)$$

где F - формфактор (Фурье образ плотности источников потенциала):

$$F = \int d\vec{x} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \rho(\vec{x}) \quad (10.4)$$

Условия применимости:

$$V_0 \ll \begin{cases} \frac{\hbar^2}{ma^2} \\ \frac{\hbar^2}{ma^2} ka, \quad ka \gg 1 \end{cases} \text{ - быстрые частицы} \quad (10.5)$$

частицы могут быть быстрыми, но всё ещё не классическими. Гарантированно классический предел наступает при $ka \gg 1$, тогда волновые пакеты будут рассеиваться, как классические частицы. Впрочем, классический предел может наступить и без выполнения этого условия, так как оно не является необходимым (например, в формуле Резерфорда).

Парциальное разложение

Парциальным называется разложение по определённым значениям орбитального момента l .

Пусть потенциал сферически симметричен $V(\vec{x}) \equiv V(r)$, и на нём рассеивается плоская волна (См. рис. 10.1). Тогда задача будет иметь цилиндрическую симметрию (симметрия относительно поворотов вокруг оси z). Тогда при разложении по углам останется только функция с $m = 0$:

$$Y_{lm}(\varphi, \theta) \rightarrow Y_{l0}(\theta, \varphi) \quad (10.6)$$

Поскольку сферическая функция зависит от φ , как $e^{im\varphi}$, то от сферических функций останутся только полиномы Лежандра

$$Y_{l0}(\theta, \varphi) \rightarrow P_l(\cos \theta) \quad (10.7)$$

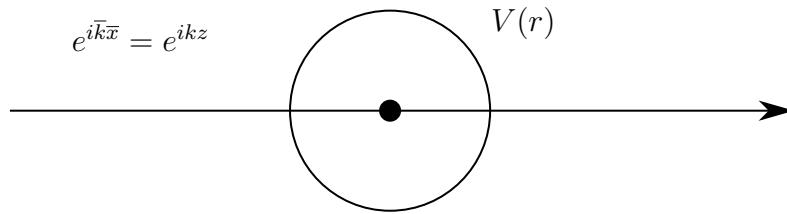


Рис. 10.1. Рассеивание плоской волны на сферически симметричном потенциале

По этим полиномам с разными l и будет вестись разложение. Напомним, что полиномы (10.7) образуют базис с весом «1» на $[-1, 1]$.

Вспомним свойство ортогональности полиномов Лежандра:

$$\int \underbrace{d\varphi \sin \theta d\theta}_{d\Omega} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) = 4\pi \cdot \frac{1}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (10.8)$$

Разложение по ним амплитуды рассеяния даёт:

$$f(\theta) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \cdot f_l, \quad (10.9)$$

где f_l зависит только от энергии. Парциальной амплитудой рассеяния называют коэффициенты разложения f_l .

Дифференциальное сечение рассеяния не раскладывается в ряд парциального разложения, поскольку l - интеграл движения, не меняется в процессе рассеяния, а следовательно, рассеяние состояний с различными l происходят независимо друг от друга. Однако если рассматривать вопрос «Сколько частиц рассеиваются под углом θ ?» (См. рис. 10.2). То при данном фиксированном θ различные сферические волны, произошедшие из разных l будут интерферировать между собой.

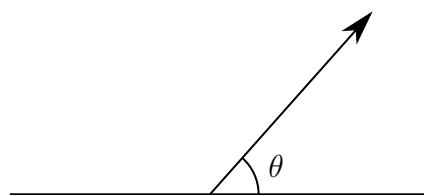


Рис. 10.2. Рассеяние частиц под углом θ

Поэтому для дифференциального сечения рассеяния можно написать двойной ряд

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{ll'} (2l+1)(2l'+1) \cdot P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) f_l f_{l'}^* = |f(\theta)|^2 \quad (10.10)$$

Полное сечение рассеяния можно разложить в парциальный ряд. Его члены учитывают вклад в рассеяние отдельно от s, p, d, f, \dots компонент. Проинтегриро-

вав (10.10), получим

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{tot}} &= \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{ll'} \cancel{(2l+1)}(2l'+1) \cdot \delta_{ll'} \cancel{\frac{1}{2l+1}} \cdot 4\pi f_l \cdot f_l^* = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} 4\pi(2l+1) |f_l|^2 = \sigma_{\text{tot}} \quad (10.11)\end{aligned}$$

Парциальным сечением рассеяния, в зависимости от источника, называется либо $|f_l|$, либо $4\pi(2l+1) |f_l|^2$.

Разложение волновой функции имеет вид

$$\psi(\bar{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \cdot R_l(r) \quad (10.12)$$

Очевидно, R_l из (10.12) должны удовлетворять радиальному стационарному уравнению Шрёдингера

$$R_l'' + \frac{2}{r} R_l' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l = 0 \quad (10.13)$$

Совершим в (10.13) замену

$$R_l = \frac{u_l}{r}, \quad (10.14)$$

с учётом (10.14) уравнение (10.13) примет вид

$$u_l'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0 \quad (10.15)$$

Границное условие в нуле:

$$u_l(r=0) = 0, \quad (10.16)$$

что необходимо при $l \neq 0$ для нормировки волновой функции, и при любом l для того, чтобы кинетическая энергия системы была конечной.

Границное условие на « ∞ »:

$$\psi(\bar{x})|_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} = \underline{e^{i\bar{k}\bar{x}}} + \frac{e^{i\bar{k}\bar{x}}}{r} f(\theta) \quad (10.17)$$

Разложим плоскую волну в (10.17) в парциальный ряд. Радиальная её часть - решение свободного уравнения Шрёдингера (в отсутствии потенциала):

$$e^{i\bar{k}\bar{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) R_l^{(0)}(r) \quad (10.18)$$

Тогда:

$$R_l^{(0)} = \frac{u_l^{(0)}}{r} \Rightarrow u_l^{(0)''} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l^{(0)} = 0 \quad (10.19)$$

Решение (10.19) записываются через функции Бесселя (так как функции Неймана имеют сингулярность в нуле, что не соответствует граничным условиям):

$$u_l^{(0)} = A \cdot \frac{1}{\sqrt{r}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(k \cdot r) \quad (10.20)$$

Обозначим шаровые функции Бесселя (шаровые функции), как

$$j_l(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x) \quad (10.21)$$

Асимптотики на ∞ :

$$J_\nu(x)|_{x \rightarrow \infty} = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right); \quad (10.22)$$

$$j_l(x)|_{x \rightarrow \infty} = \frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) \quad (10.23)$$

Из математики известно, что:

$$e^{ik\bar{x}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \underline{i}^l \cdot j_l(kr) \quad (10.24)$$

Откуда с учётом (10.18), (10.19), (10.20) можно определить константу A из (10.20).

Итак, имеем, что $u_l(r)$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера, а также что (10.16) и $u_l(r \rightarrow \infty)$ удовлетворяет свободному уравнению Шредингера. Тогда

$$\begin{aligned} u_l'' + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} E}_{k^2} u_l = 0 \Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} u_l &= D \cdot \frac{1}{k} \cos\left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2}\right) = \\ &= \frac{D}{2k} \left(e^{ikr+i\delta_l-i\frac{\pi(l+1)}{2}} + e^{-ikr-i\delta_l+i\frac{\pi(l+1)}{2}} \right) \end{aligned} \quad (10.25)$$

Вспомним уравнение для потока вероятности, применительно к нашей задаче оно имеет вид:

$$\frac{d}{dx} j(x) = 0, \quad (10.26)$$

Тогда, учитывая, что $u_l(r \rightarrow \infty) = 0$, и (10.26), получим

$$j(r \rightarrow 0) = 0 \quad (10.27)$$

Тогда если волновая функция имеет вид:

$$Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (10.28)$$

то $j(x)$ не интерферируют и состоит из 2-ч вкладов:

$$j = \underbrace{\frac{\hbar k}{m} |A|^2}_{\text{направо}} - \underbrace{\frac{\hbar k}{m} |B|^2}_{\text{влево}}; \quad (10.29)$$

Тогда с учётом (10.26), (10.27) из (10.29) получим, что

$$|A|^2 = |B|^2 \quad (10.30)$$

Аналогично из (10.25) найдём, что δ_l должна быть вещественным числом. (Отметим, что в случае падения на центр $\text{Im } \delta_l > 0$).

Сравним (10.25) с парциальным разложением для волновой функции:

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{u_l(r)}{r} = \\ & = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \cdot i^l \underbrace{\frac{1}{kr} \cos \left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2} \right)}_{j_l(kr)} + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) f_l}_{f(\theta)} \quad (10.31) \end{aligned}$$

Приравняем коэффициенты при соответствующих $e^{\pm i\delta_l}$ при данном постоянном l , тогда для $\frac{e^{ikr}}{r}$ получим:

$$\frac{D}{2k} e^{i\delta_l - i\frac{\pi(l+1)}{2}} = i^l \frac{1}{2k} \cdot e^{-i\frac{\pi(l+1)}{2}} + f_l; \quad (10.32)$$

Для $\frac{e^{-ikr}}{r}$:

$$\frac{D}{2k} e^{-i\delta_l + i\frac{\pi(l+1)}{2}} = i^l \frac{1}{2k} e^{i\frac{\pi(l+1)}{2}} \quad (10.33)$$

Из (10.33) получим, что

$$D = i^l \cdot e^{i\delta_l} \quad (10.34)$$

Подставим (10.34) в (10.32):

$$\frac{i^l \cdot e^{i\delta_l}}{2k} \cdot e^{i\delta_l - i\frac{\pi(l+1)}{2}} = i^l \frac{1}{2k} \cdot e^{-i\frac{\pi(l+1)}{2}} + f_l \quad (10.35)$$

Уравнение (10.35) накладывает ограничение на парциальные амплитуды f_l .

Заметим, что

$$i^l \underbrace{e^{-\frac{\pi i(l+1)}{2}}}_{i^{-l-1}} = \frac{1}{i} \quad (10.36)$$

Таким образом из (10.35), с учётом (10.36) получаем:

$$\begin{aligned} f_l &= \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \Rightarrow \\ \Rightarrow f_l &= \frac{e^{i\delta_l}}{k} \sin \delta_l \end{aligned} \quad (10.37)$$

Условие унитарности для парциальных амплитуд рассеяния

Из (10.37) получим

$$|f_l|^2 = \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2} \quad (10.38)$$

С другой стороны, из (10.37) получим мнимую часть:

$$\operatorname{Im} f_l = \frac{\sin \delta_l}{k} \cdot \sin \delta_l = \frac{\sin^2 \delta_l}{k} = |f_l|^2 \cdot k \quad (10.39)$$

Таким образом, получим условие унитарности для парциальных амплитуд в случае отсутствия падения на центр:

$$\operatorname{Im} f_l = k \cdot |f_l|^2 \quad (10.40)$$

Рецепт решения задач

Нужно решить стационарное уравнение Шрёдингера, после чего для u_l нужно найти асимптотику при $r \rightarrow \infty$, которая известна:

$$u_l \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) \quad (10.41)$$

После чего останется найти только kr , откуда из (10.41) находится δ_l откуда находятся f_l , и вся амплитуда рассеяния $f(\theta)$ получается в виде ряда.

Формулы парциального рассеяния в терминах фазы рассеяния

Полное сечение рассеяния:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{l=0}^{\infty} 4\pi(2l+1) \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2}; \quad (10.42)$$

Волновая функция:

$$\psi(\bar{x})|_{r \rightarrow \infty} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \cdot i^l \cdot e^{i\delta_l} \frac{1}{kr} \cdot \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) \quad (10.43)$$

Рассмотрим амплитуду рассеяния

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \cdot f_l \quad (10.44)$$

Пусть $\theta = 0 \Rightarrow$:

$$\begin{aligned} f(\theta = 0) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \underbrace{P_l(1)}_{=1} \cdot f_l \Rightarrow \\ &\Rightarrow \operatorname{Im} f(\theta = 0) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \underbrace{\operatorname{Im} f_l}_{=k|f_l|^2} \times \frac{4\pi}{k} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(\theta = 0) = \sum_{l=0}^{\infty} 4\pi(2l+1) |f_l|^2 = \sigma_{\text{tot}} \quad (10.45) \end{aligned}$$

Физический смысл (10.45) ясен: всё частицы, которые куда-то рассеялись, были «выбиты» плоской волной, которая может интерферировать во сферической расходящейся волной только при $\theta = 0$.

(10.45) представляет собой оптическую теорему. Её физический смысл: мнимая часть амплитуды рассеяния вперёд вычитает вероятность из исходной налетающей плоской волны (Закон сохранения вероятности).

Метастабильные уровни и их резонансы в рассеянии

Имеем решение u_l и асимптотику $u_l|_{r \rightarrow \infty}$:

$$A(k)e^{ikr} + B(k)e^{-ikr} \quad (10.46)$$

Тогда из закона сохранения потока вероятности:

$$\left. \begin{aligned} A(k)e^{ikr} + B(k)e^{-ikr} \\ |A(k)| = |B(k)| \end{aligned} \right\} \rightarrow \delta_l \quad (10.47)$$

Лекция 11

Метастабильные уровни и их резонансы в рассеянии

Итак, известен рецепт решения задач рассеяния на сферически симметричном потенциале. В случае сферически симметричного потенциала нужно решить радиальное уравнение Шрёдингера:

$$u_l'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l = 0 \quad (11.1)$$

Находим асимптотику:

$$u_l(r \rightarrow \infty) = \underbrace{\frac{1}{k} i^l e^{i\delta_l}}_{=const} \cdot \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right); \quad (11.2)$$

обозначим

$$V_l(r \rightarrow \infty) \equiv \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right), \quad (11.3)$$

где V_l - вещественные решения уравнения Шрёдингера, то

$$V_l = c \cdot \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) = A(k)e^{ikr} + B(k)e^{-ikr} \quad (11.4)$$

из вещественности V_l следует, что

$$B(k) = A^*(k) \quad (11.5)$$

Заметим, что

$$\arg B(k) = -\delta_l + \frac{\pi(l+1)}{2} \quad (11.6)$$

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для всевозможных комплексных k (См. рис. 11.1).

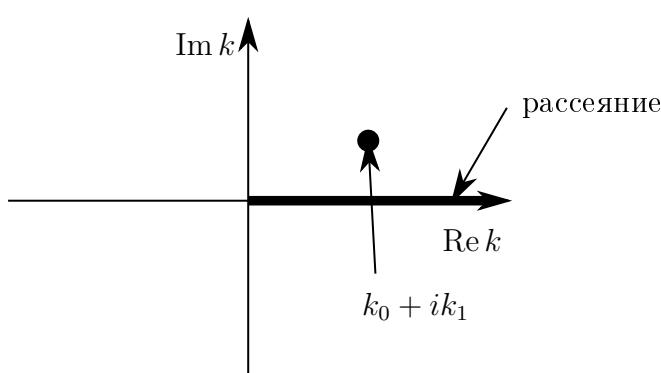


Рис. 11.1. Комплексная плоскость k с выделенной областью, для которой характерно рассеяние

Зададимся вопросом решения уравнения:

$$B(k) = 0 \quad (11.7)$$

Теорема

При $k_1 > 0$; $k_0 \neq 0$ уравнение (11.7) не имеет корней.

Так как $B(k) = 0$, то

$$A(k_0 + ik_1)e^{ik_0r - k_1r} \quad (11.8)$$

- квадратично интегрируемое решение уравнения Шрёдингера, которому соответствует энергия:

$$E + \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k_0^2 - k_1^2 + \underbrace{2ik_0k_1}_{\text{компл.}} \right) \quad (11.9)$$

Однако известно, что \hat{H} - эрмитов оператор, который не может иметь комплексных собственных значений.

При $k_0 = 0$:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}k_1^2 \quad (11.10)$$

энергия становится отрицательной.

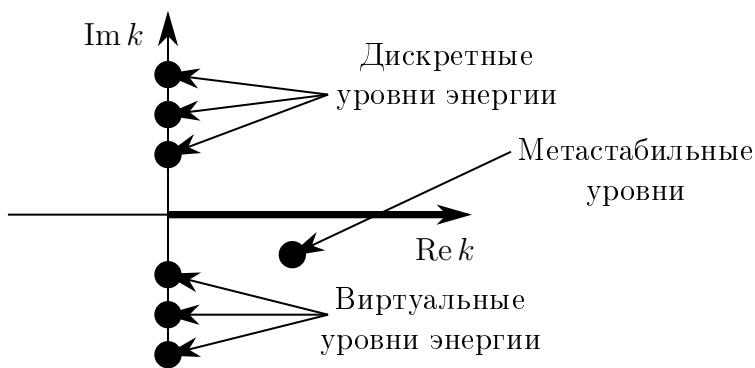


Рис. 11.2. Дискретные, виртуальные и метастабильные уровни

Аналогичная ситуация происходит для левой полуплоскости. В верхней полуплоскости k корни уравнения (11.7) существуют только при $k_0 = 0$. Уровни, соответствующие таким корням называются дискретными уровнями энергии. В нижней полуплоскости k корни (11.7) могут находиться везде. Уровни энергии, которые соответствуют корням (11.7) таким, что $k_0 = 0, k_1 < 0$, называются виртуальными уровнями энергии; уровни, для которых $k_0 \neq 0, k_1 < 0$, называются метастабильными (См. рис. 11.2).

Непосредственного физического смысла виртуальные и метастабильные уровни не несут, так как экспоненциально растут на бесконечности. Их асимптотика:

$$e^{k_1 r} \quad \text{или} \quad e^{ik_0r + k_1 r} \quad (11.11)$$

Для свободного стационарного уравнения Шрёдингера решение $e^{\alpha x}$ не принадлежит никакому спектру (ни дискретному, ни непрерывному), то есть не является

ни собственным вектором, ни обобщённым собственным вектором. Аналогично для решений (11.11).

Выясним смысл виртуальных уровней (См. рис. 11.3).

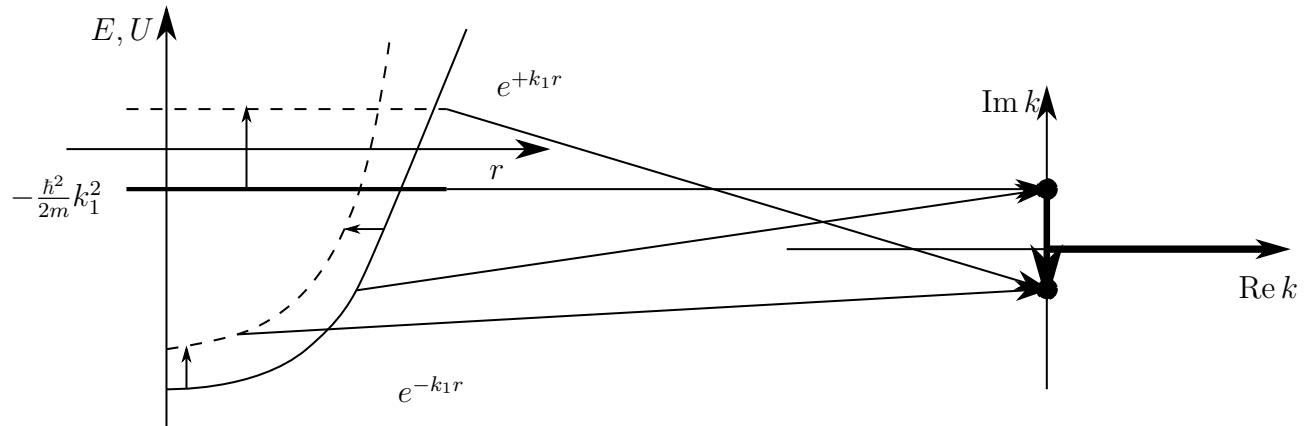


Рис. 11.3. Переход дискретного уровня в виртуальный

При уменьшении ширины или глубины потенциальной ямы соответствующие этой яме дискретные уровни поднимаются и в какой-то момент переходят значение равное нулю, соответствующие им \$k_1\$ перемещаются вниз по оси \$\text{Im } k\$ и становятся «зародышем» дискретного уровня. Аналогично выясняем, что справедливо и обратное: при увеличении глубины или ширины ямы виртуальные уровни становятся дискретными (См. рис. 11.4).

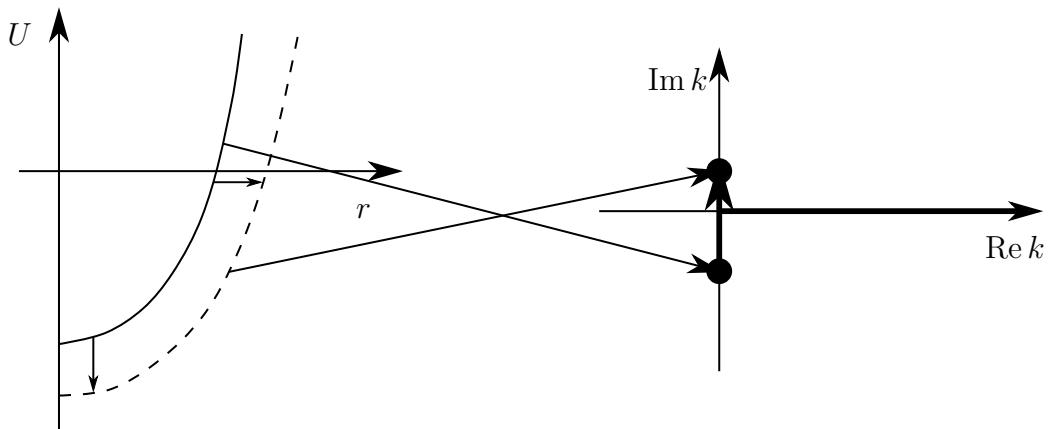


Рис. 11.4. Переход виртуального уровня в дискретный

Метастабильные уровни

Рассмотрим корень уравнения (11.7) \$k_0 - ik_1\$, где \$k_1 \ll k_0\$ (См. рис. 11.5). Ему соответствует энергия:

$$E = \frac{2m}{\hbar^2} \left(k_0^2 - \cancel{k_1^2} + 2ik_0k_1 \right) = E_0 - iE_1 = E_0 - i\frac{\Gamma}{2} \quad (11.12)$$

88

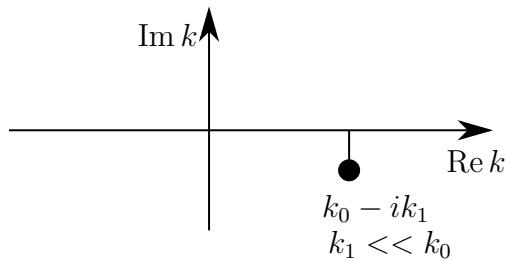


Рис. 11.5. Метастабильный уровень

Вспомним, что решения стационарного уравнения Шрёдингера также являются решениями нестационарного уравнения Шрёдингера. Например, если ψ_E - решение стационарного уравнения Шрёдингера, то

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \psi_E \quad (11.13)$$

- решение нестационарного уравнения Шрёдингера. Тогда с учётом (11.12), (11.13) можно записать

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t - \frac{\Gamma}{2\hbar}t} \cdot A \cdot e^{ik_0r + k_1r} \quad (11.14)$$

Метастабильные уровни, как правило, появляются в потенциалах, представляющих собой неидеальные потенциальные ловушки (См. рис. 11.6).

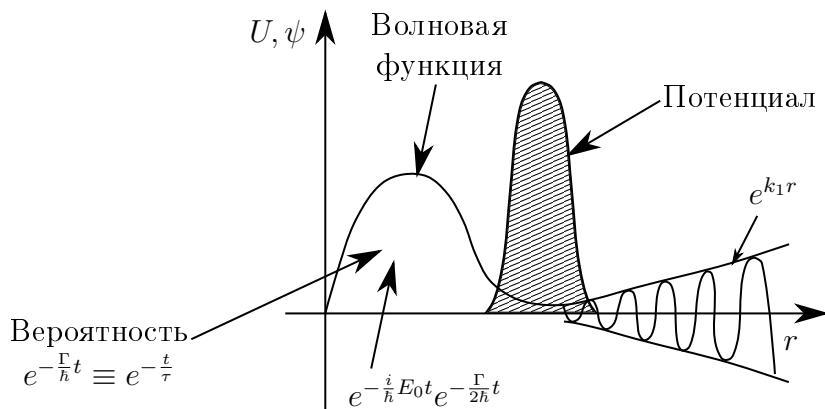


Рис. 11.6. Потенциал, в котором появляется метастабильный уровень (заштрихован) и волновая функция, соответствующая метастабильному уровню

Таким образом, волновая функция в ловушке будет медленно распадаться с течением времени, как $e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar}t}$. Введём обозначение $\frac{\Gamma}{\hbar} \equiv \frac{1}{\tau}$, где τ - время жизни метастабильного состояния. Аналогично спадает и вероятность обнаружить частицу в ловушке.

Отделим комплексную и вещественную части в показателе экспоненты:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2 t + ik_0 r} \cdot e^{-\frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2m} 2k_0 k_1 t + k_1 r} = \\ = \exp \left[ik_0 \left(r - \underbrace{\frac{\hbar k_0}{2m}}_{\text{фаз. скор.}} t \right) \right] \cdot \exp \left[k_1 \left(r - \underbrace{\frac{\hbar k_0}{m}}_{\text{групп. скор.}} t \right) \right] \quad (11.15)$$

Закон сохранения вероятности выполняется и при метастабильных состояниях (См. рис. 11.7). Вероятность встретить частицу в ловушке со временем убывает,

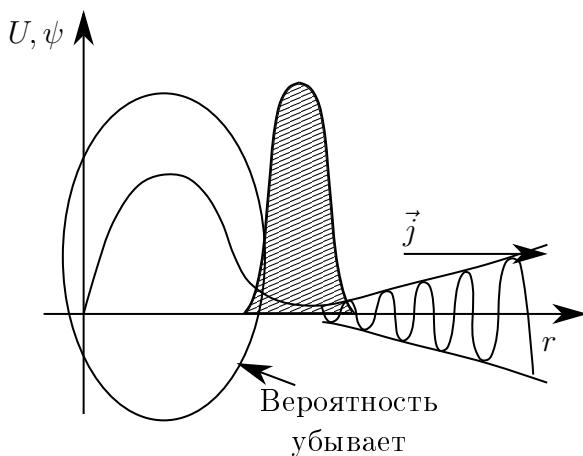


Рис. 11.7. Закон сохранения вероятности при метастабильном состоянии

уменьшение вероятности происходит за счёт потока вероятности \vec{j} .

Нормировка волновой функции в метастабильном состоянии происходит из следующих соображений. Вспомним, что решение для непрерывного спектра при свободном движении по всей бесконечной оси:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t + ik_0 x} \quad (11.16)$$

Оно представляет собой обычный косинус (или синус) (пунктир на рис. 11.8), который движется вдоль оси с фазовой скоростью. Обрезав такую плоскую волну получится волновой пакет. Если решать нестационарное уравнение Шредингера внутри волнового пакета, то это решение (внутри) не будет отличаться от всей плоской волны. Тогда, решение неизвестно только по краям волнового пакета.

Полученный волновой пакет представляет собой квадратично интегрируемую линейную комбинацию базиса плоских волн (линейная комбинация состояний непрерывного спектра).

Аналогично можно поступить с решением для метастабильного состояния (обрезать его). Тогда, получится тоже линейная комбинация состояний непрерывного спектра с вещественными энергиями. Данное обрезанное решение будет эволюционировать аналогично волновому пакету, изображённому на рис. 11.8. Амплитуда волновой функции внутри ловушки с течением времени будет убывать, в то же время «хвост», уходящий на бесконечность будет за счёт этого вырастать, что будет соответствовать уходу частицы из ловушки (См. рис. 11.9).

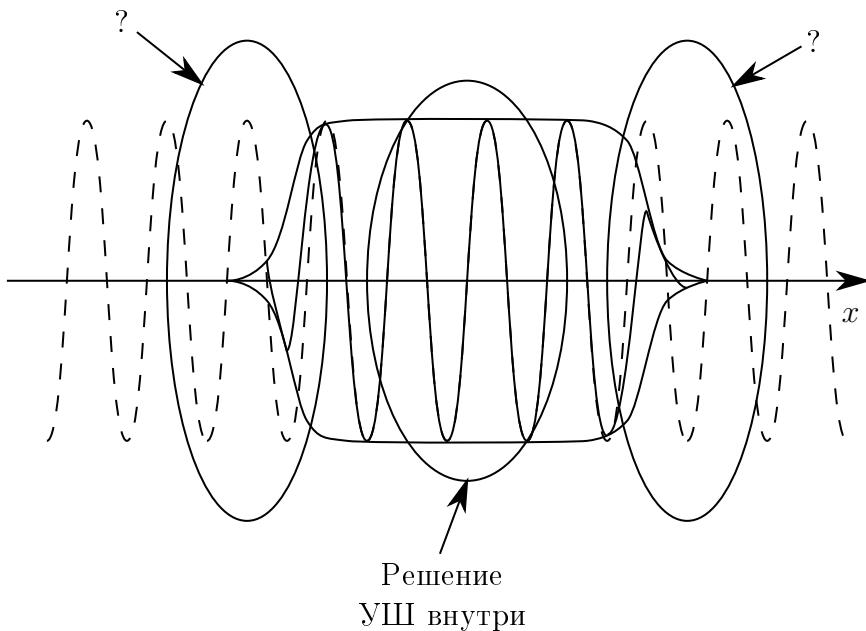


Рис. 11.8. Волновой пакет (пунктир - решение уравнения Шрёдингера для непрерывного спектра при свободном движении)

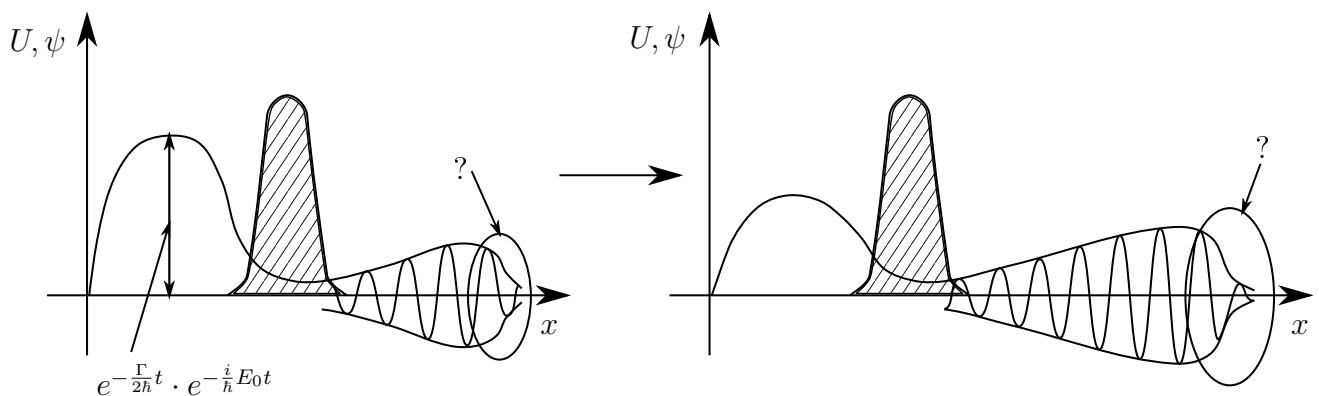


Рис. 11.9. Эволюция во времени решения для метастабильного состояния

Вспомним привычную задачу. В α -активном ядре с кулоновским потенциалом находится частица (См. рис. 11.10). Нужно найти вероятность частицы покинуть ядро и время жизни частицы в таком состоянии.

Вероятность туннелирования частицы действительно можно найти по формуле:

$$e^{-2 \int_{r_1}^{r_2} \alpha dr} \quad (11.17)$$

Однако, чтобы правильно найти время жизни частицы, нужно решить радиальное уравнение Шрёдингера с асимптотикой на $\langle\infty\rangle$:

$$e^{ik_0 r + k_1 r} \quad (11.18)$$

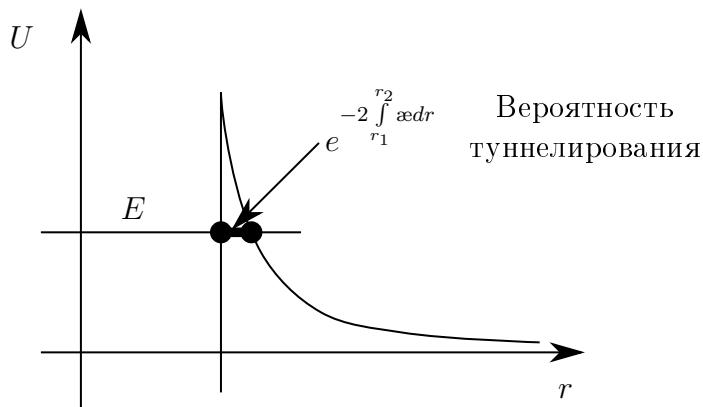


Рис. 11.10. Туннелирование частицы сквозь барьер

Оттуда найти k_0 и k_1 , из них получить Γ , через которое определяется время жизни частицы τ (как в дискретном уровне ($e^{-k_1 r}$), только тут асимптотика метастабильного уровня (11.18)).

Эти «недоделанные» дискретные уровни (распадающиеся) проявляются в задаче рассеяния. Рассмотрим метастабильный уровень, соответствующий $k_0 - ik_1$ и вещественную δk окрестность с центром в k_0 такую, что $k_1 \ll \delta k \ll k_0$ (См. рис. 11.11).

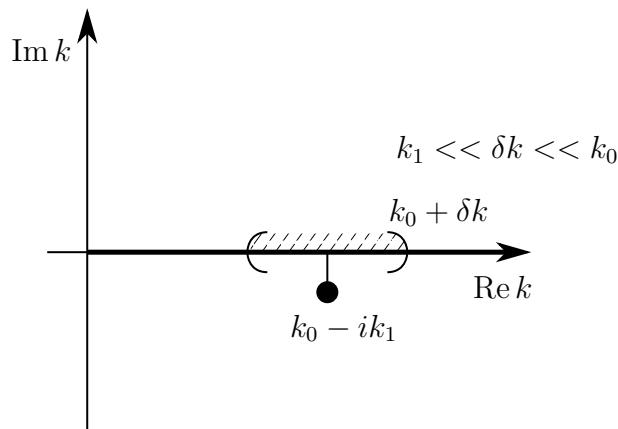


Рис. 11.11. Проявление метастабильного уровня в рассеянии

Тогда в любой точке окрестности $(k_0 + \delta k)$ будет верно:

$$\arg B \equiv -\delta_l + \frac{\pi(l+1)}{2} \quad (11.19)$$

В таком случае разложим $B(k_0 + \delta k)$ в ряд Тейлора с центром в метастабильном

уровне. Тогда:

$$\begin{aligned} B(k_0 + \delta k) &= \cancel{B(k_0 - ik_1)}^0 + B'(k_0 - ik_1) \cdot [k_0 + \delta k - (k_0 - ik_1)] + \dots \Rightarrow \\ &\Rightarrow \arg B(k_0 + \delta k) = \arg B' + \underbrace{\arg(\delta k + ik_1)}_{\arctg\left(\frac{k_1}{\delta k}\right)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \delta_l(k_0 + \delta k) = \underbrace{\frac{\pi(l+1)}{2}}_{\delta_l^{(0)}} - \arg B' - \arctg\left(\frac{k_1}{\delta k}\right), \quad (11.20) \end{aligned}$$

где $\delta_l^{(0)}$ - фоновая фаза рассеяния (обычно она равна 0).

Тогда для нулевой фоновой фазы рассеяния δ_l будет представлять собой арктангенс (См. рис. 11.12).

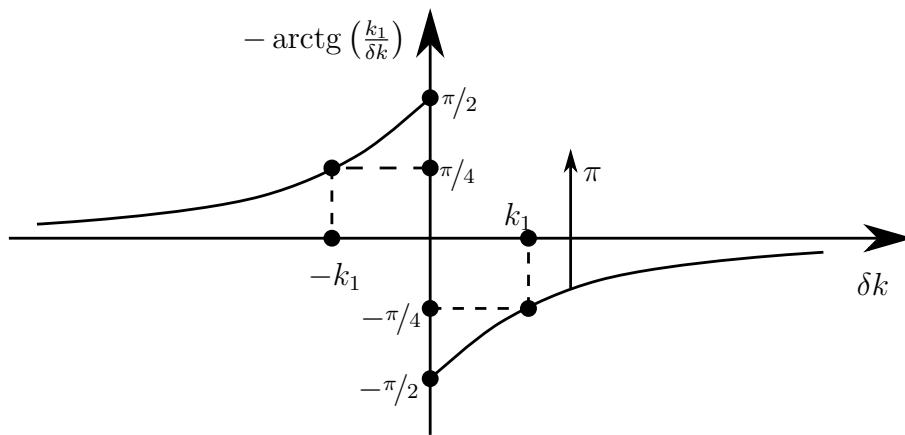


Рис. 11.12. График арктангенса

Поскольку парциальная амплитуда рассеяния зависит от фазы рассеяния, как:

$$f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1), \quad (11.21)$$

то фаза рассеяния определена с точностью до π . Подняв правую часть рис. 11.12 на π , получим график для фазы рассеяния (См. рис. 11.13).

Вспомним, что полное сечение рассеяния:

$$\sigma_{\text{tot}} = \underbrace{\sum_{l=0}^{\infty} 4\pi(2l+1) \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_l}_{\approx k_0^2 \approx \text{const}} \quad (11.22)$$

Тогда возможны различные варианты.

Пусть $\delta_l^{(0)} = 0$, то сечение будет иметь вид Лоренцевой кривой (См. рис. 11.11):

$$\sin^2 \left[\arctg \left(\frac{k_1}{\delta k} \right) \right] = \frac{k_1^2}{k_1^2 + \delta k^2} \quad (11.23)$$

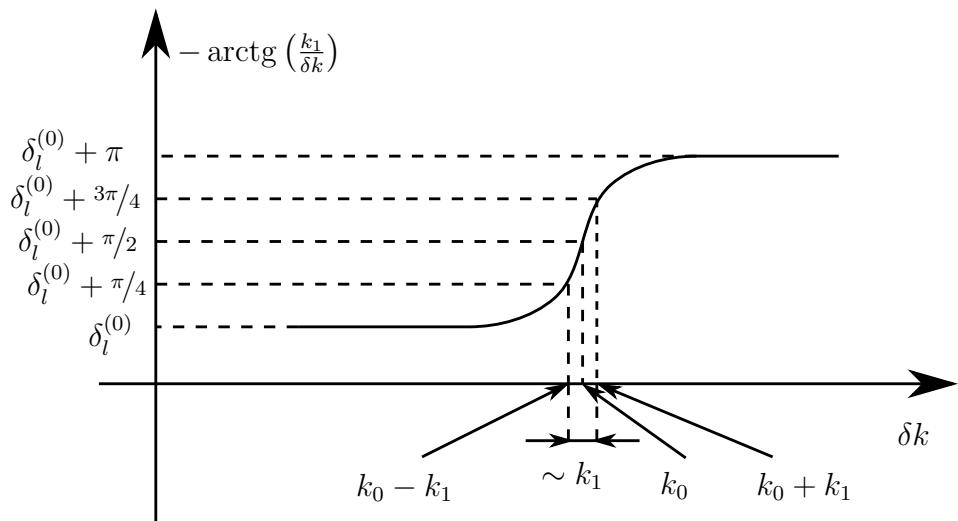


Рис. 11.13. Фаза рассеяния

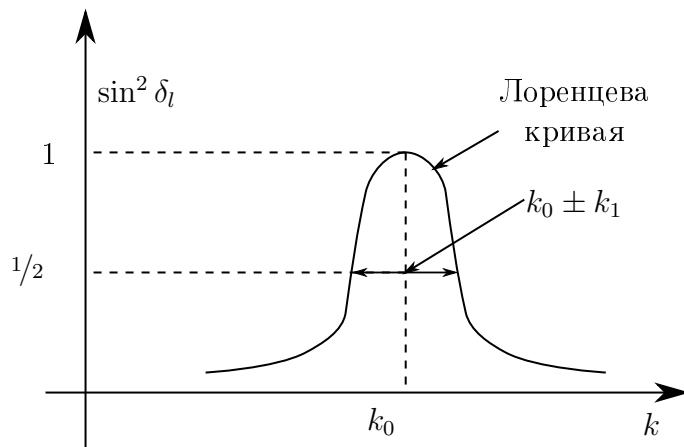


Рис. 11.14. Полное сечение при $\delta_l^{(0)} = 0$

Пусть $\delta_l^{(0)} = \frac{\pi}{2}$, то (См. рис. 11.15)

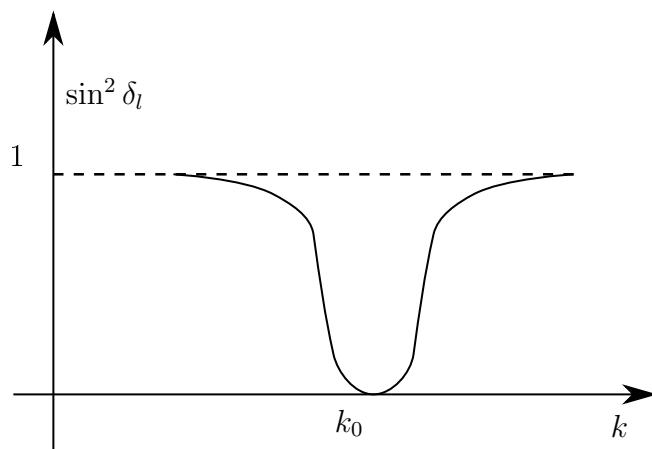


Рис. 11.15. Полное сечение при $\delta_l^{(0)} = \frac{\pi}{2}$

Пусть $\delta_l^{(0)} = \frac{\pi}{4}$, то (См. рис. 11.16)

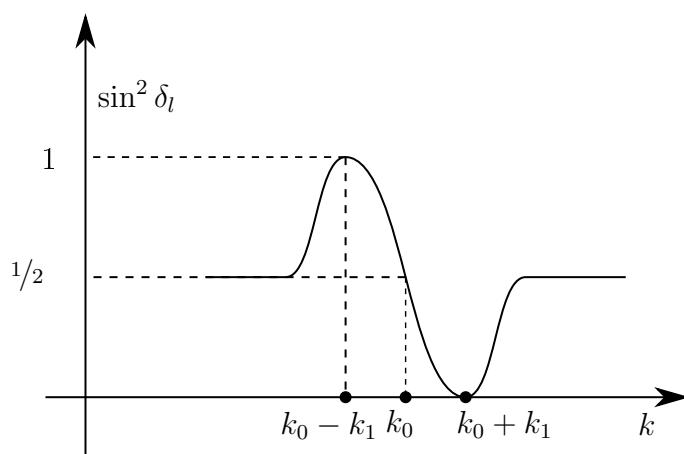


Рис. 11.16. Полное сечение при $\delta_l^{(0)} = \frac{\pi}{4}$

Пусть $\delta_l^{(0)} = \frac{3\pi}{4}$, то (См. рис. 11.17)

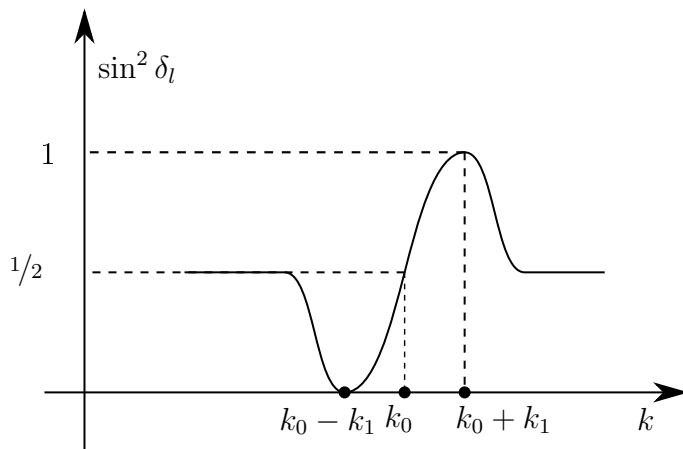


Рис. 11.17. Полное сечение при $\delta_l^{(0)} = \frac{3\pi}{4}$

Динамическая картина

Мы уже рассматривали одномерную задачу рассеяния в потенциале «ловушке» (См. рис. 11.18).

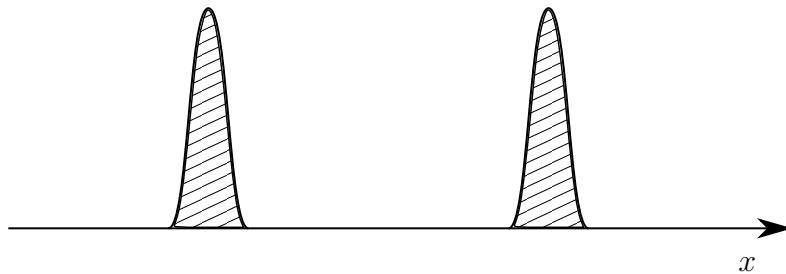


Рис. 11.18. Одномерный потенциал «ловушка»

При решении данной задачи в отсутствии резонанса мы считали, что $A(k_0 + \delta k) \approx A(k_0)$, и получали отражённый T и пройденный R волновые пакеты. В случае резонанса они также появятся, однако наряду с этим в самой ловушке возникнет метастабильный уровень, который будет испускать через потенциалы поток вероятности. Этот поток будут улавливать волновые пакеты (См. рис. 11.19).

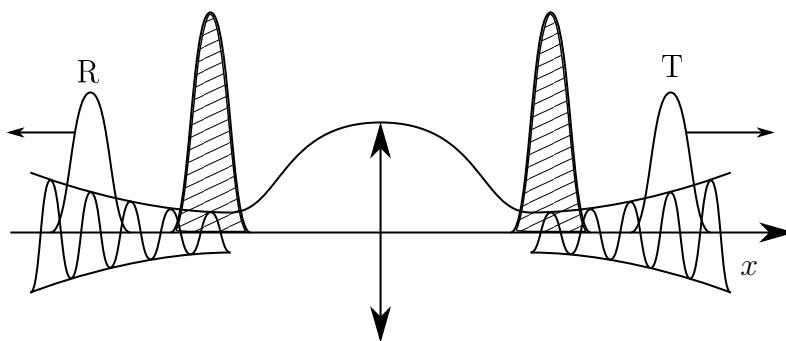


Рис. 11.19. Одномерное рассеяние в случае резонанса

Лекция 12

Теория рассеяния для низких и высоких энергий

Теория рассеяния для низких энергий

В действительности, в данном пункте будет рассмотрена теория рассеяния для медленных частиц. Для них $ka \ll 1$, то есть длина волны больше характерной длины потенциала. Напомним, что

$$U_l \equiv rR_l \quad (12.1)$$

решение, которое удовлетворяет условиям асимптотики на бесконечности. В то время, как у функций V_l асимптотика:

$$V_l|_{r \rightarrow \infty} = C \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right), \quad (12.2)$$

где C - вещественное. Данная асимптотика получается в области III (См. рис. 12.1).

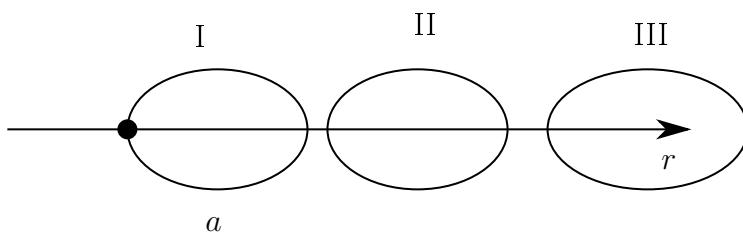


Рис. 12.1. Области действия приближений: I - область локализации потенциала; II - область, в которой главную роль играет центробежный потенциал $r > a$ и $kr \ll l$; III - асимптотика на бесконечности

Вспомним, из уравнения Шрёдингера для V_l получается:

$$V_l'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) V_l = 0, \quad (12.3)$$

где E сопоставима с остальными слагаемыми при $r \sim \frac{1}{k}$. Поскольку в нашем случае:

$$\underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} E}_{=k^2} \ll \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (12.4)$$

то при $r \ll \frac{l}{k}$ можно пренебречь слагаемым с энергией.

При $l = 0$ данное рассуждение также работает, так как на расстояниях $r \ll \frac{1}{k}$ слагаемым k^2 можно пренебречь, поскольку решение с k : $\sin(kr)$ или $\cos(kr)$ мало отличаются от решений без k : r^1 или r^0 при $r \ll \frac{1}{k}$.

Поскольку в области II (См. рис. 12.1) уже нет влияния потенциала и слагаемым с k^2 можно пренебречь, тогда рассмотрим в этой области общее решение уравнения Шрёдингера:

$$C \cdot j_l(kr) + D \cdot \eta_l(kr), \quad (12.5)$$

учитывая асимптотики на бесконечности:

$$j_l(kr)|_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{kr} \cos \left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) \quad (12.6)$$

$$\eta_l(kr)|_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) \quad (12.7)$$

С учётом особенностей области II решения (12.2) и (12.5) должны сшиваться. Учтём, что

$$\begin{aligned} V_l|_{r \rightarrow \infty} &= F \cos \left(kr + \delta_l - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) = \\ &= F \cos \left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) \cos \delta_l - F \sin \left(kr - \frac{\pi(l+1)}{2} \right) \sin \delta_l \end{aligned} \quad (12.8)$$

Тогда из (12.8) увидим (сравнивая при $r > 0$ с (12.5) с учётом (12.6), (12.7)), что отношение коэффициентов перед синусом и косинусом - это $-\tan \delta_l$:

$$\tan \delta_l = -\frac{D}{C} \quad (12.9)$$

Теперь перейдём в область $kr \ll l$, там (12.6), (12.7) примут вид:

$$\begin{aligned} (kr) \cdot j_l|_{r \rightarrow 0} &\sim (kr)^{l+1} \\ (kr) \cdot \eta_l|_{r \rightarrow 0} &\sim (kr)^{-l} \end{aligned} \quad (12.10)$$

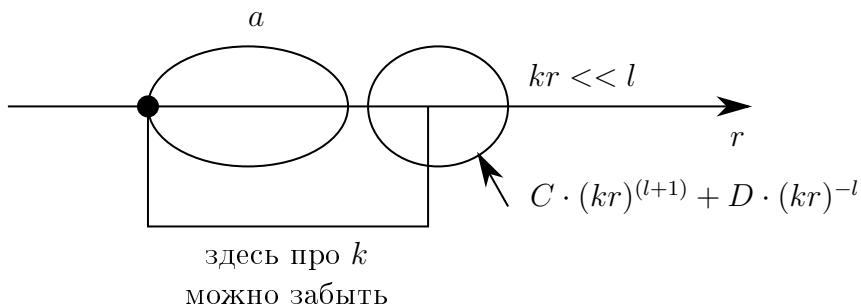


Рис. 12.2. Сшивание решений для асимптотик в нуле. Отмечена область, в которой влиянием k можно пренебречь

Забывая про k (См. рис. 12.2) можем записать:

$$\begin{aligned} r > a : V_l'' + \frac{2m}{\hbar^2} \left(0 - \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{l(l+1)}{r^2} \right) V_l &= 0 \\ r < a : V_l'' + \left(0 - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) V_l &= 0 \end{aligned} \quad (12.11)$$

Поскольку решения (12.11) от k не зависят, то асимптотики их имеет смысл переписать через $\left(\frac{r}{a}\right)^{l+1}$ и $\left(\frac{r}{a}\right)^{-l}$.

Получим для области, где кончился потенциал (См. рис. 12.2):

$$\begin{aligned} V_l \sim A \left(\frac{r}{a}\right)^{l+1} + B \left(\frac{r}{a}\right)^{-l} &= C(kr)^{l+1} + D(kr)^{-l} \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{Dk^{-l}}{Ck^{l+1}} &= \frac{Ba^l}{Aa^{-l-1}} \Rightarrow -\operatorname{tg} \delta_l = \frac{D}{C} = \frac{B}{A}(ka)^{2l+1} \Rightarrow \\ \operatorname{tg} \delta_0 &\sim G \cdot (ka)^1 \\ \Rightarrow \underline{\operatorname{tg} \delta_1} &\sim \underline{G' \cdot (ka)^3}, \quad (12.12) \\ \underline{\operatorname{tg} \delta_2} &\sim \underline{G'' \cdot (ka)^5} \end{aligned}$$

где учтён порядок малости величин.

Значит,

$$\operatorname{tg} \delta_0 \equiv \delta_0 \equiv -\frac{B}{A}ka = k \cdot d, \quad (12.13)$$

где d - длина рассеяния.

Парциальный ряд будет иметь вид:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^0 (2l+1)P_l(\cos \theta) \cdot f_l = 1 \cdot 1 \cdot f_0 = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin \delta_0 = \frac{1}{k} \cdot kd = d \quad (12.14)$$

Таким образом, мы получаем следующие выводы:

- 1) При низких энергиях рассеяние изотропно (в нём участвует только s -волна), и полное сечение рассеяния есть:

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{l=0}^0 4\pi(2l+1) \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2} = 4\pi \frac{\sin^2(kd)}{k^2} = 4\pi d^2 \quad (12.15)$$

- 2) При низких энергиях полное сечение рассеяния не зависит от энергии.
- 3) Первые два вывода, вообще говоря, неверны в случае, если A - физический нуль. Тогда получается резонанс:

$$-\operatorname{tg} \delta_l = \underbrace{\frac{B}{A}}_{=0} (ka)^{2l+1} \rightarrow \infty \Rightarrow \delta_l = \pm \frac{\pi}{2} \quad (12.16)$$

Если резонанс в s -волне, тогда

$$\delta_l \sim \pm \frac{\pi}{2} \Rightarrow \sigma_{\text{tot}} = 4\pi \frac{\sin^2 \left(\frac{\pi}{2}\right)}{k^2} = \frac{4\pi}{k^2} \sim \frac{4\pi}{E} \quad (12.17)$$

Данные резонансы можно обнаружить как на дискретном, так и на виртуальном уровне, в случае близкого расположения k к действительной оси (См. рис. 12.3).

Пусть имеется какая-то прямоугольная потенциальная яма (См. рис. 12.4) решение в отсутствие потенциала:

$$j_0 \sim \sin(kr) \quad (12.18)$$

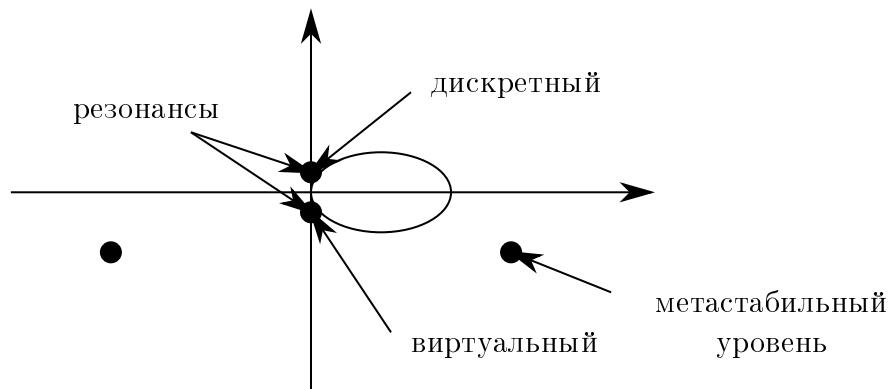


Рис. 12.3. Комплексная плоскость k с обозначением значений k , при которых можно обнаружить описанные резонансы

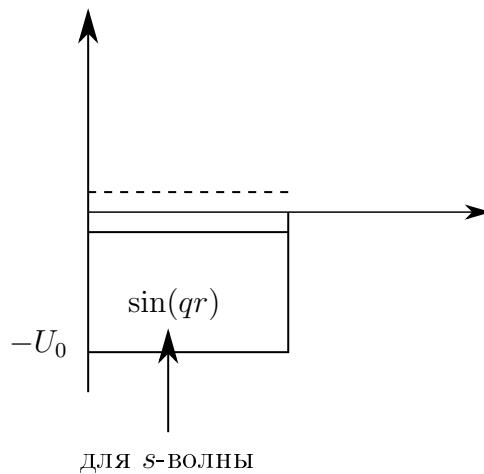


Рис. 12.4. Прямоугольная яма с отмеченным дискретным (сплошная линия) и виртуальным (пунктир) уровнями

в потенциале

$$\eta_0 \sim \cos(kr) \Rightarrow \delta_0 = \frac{\pi}{2} \quad (12.19)$$

тогда решение будет сшиваться на границе, и резонанс будет наблюдаться, если в этой яме умещается четверть волны с маленькой погрешностью (См. рис. 12.5).

В случае, если попытаться найти решение с чисто мнимым k на бесконечности, то решение сшивается и с $e^{-\alpha r}$ (дискретный уровень), и с $e^{+\alpha r}$ (виртуальный уровень). Здесь предполагается, что α - мало.

Данное рассуждение подходит не только для прямоугольной ямы, но и для конечной ямы любой формы.

В случае, если $l \neq 0$ асимптотика на бесконечности обычна представляет какуюлибо из функций Инфельда I или Макдональда K . Для дискретного уровня подходит только K . Для виртуального вспомним, что

$$I_{1/2}(x) \sim \operatorname{sh}(x) \quad (12.20)$$

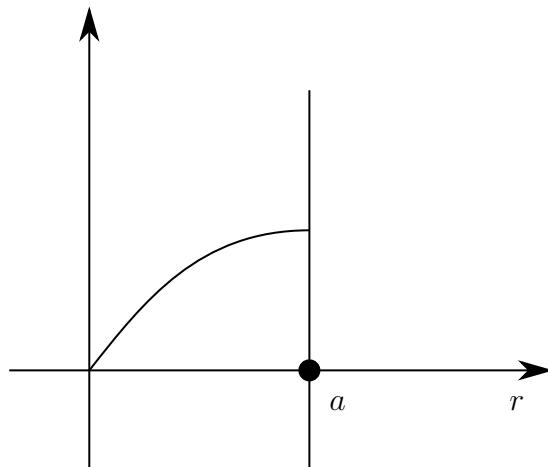


Рис. 12.5. Длина волны частицы в яме, изображённой на рис. 12.4 в случае резонанса

а у виртуального уровня асимптотика либо $e^{+\alpha x}$, либо $e^{-\alpha x}$. Правильная асимптотика для виртуального уровня получается следующим путём: поскольку K есть модификация функции Ханкеля первого рода $H^{(1)}$ (у дискретного уровня), то для виртуального уровня в качестве асимптотики подойдёт модифицированная функция Ханкеля второго рода $H^{(2)}$ (там одна растущая экспонента). Кроме этого рассуждение аналогично предыдущим.

Теория рассеяния при высоких энергиях (приближение эйконала)

В случае высоких энергий в теории рассеяния выполняется условие:

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2 \gg V_0 \quad (12.21)$$

Решение задачи рассеяния при таком условии состоит из двух частей.

1) Применение при условии (12.21) аналога функции из ВКБ в 3-х мерном пространстве (квазиклассика).

На какой-то центральный потенциал падает плоская волна (См. рис. 12.6). Ввиду симметрии имеет смысл перейти из декартовых координат в цилиндрические $(x, y, z) \rightarrow (\rho, \varphi, z)$. Функция ВКБ в нашем случае будет иметь вид:

$$\psi(\rho, z) = e^{i \int_{-\infty}^z \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\rho, z))} dz}, \quad (12.22)$$

где (поскольку потенциал - центрально-симметричный)

$$V(r) = V\left(\sqrt{\rho^2 + z^2}\right) \quad (12.23)$$

При интегрировании (12.22) до нуля, очевидно получается всё та же плоская волна. А после потенциала решение будет представлять собой, помимо плоской волны, часть (прошедшую через область действия потенциала) с набегом фазы (См. рис. 12.7), в чём можно увидеть аналогию с оптикой и прохождением оптической волны через

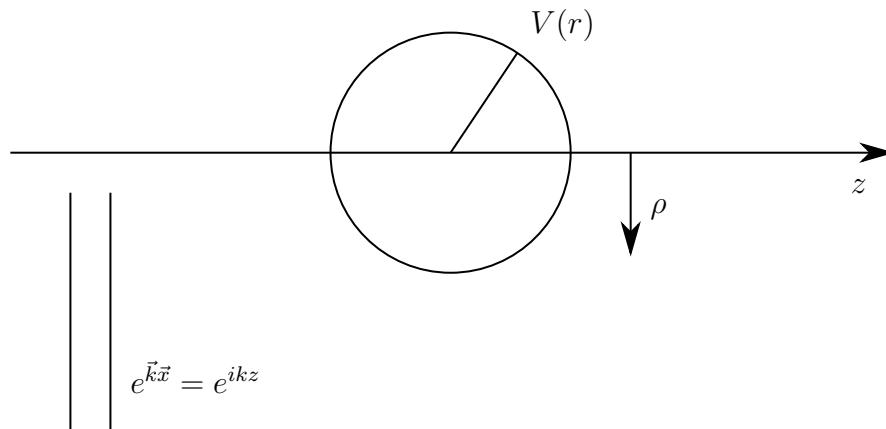


Рис. 12.6. Постановка задачи рассеяния при высоких энергиях на центральном потенциале (на рисунке обозначена область действия потенциала)

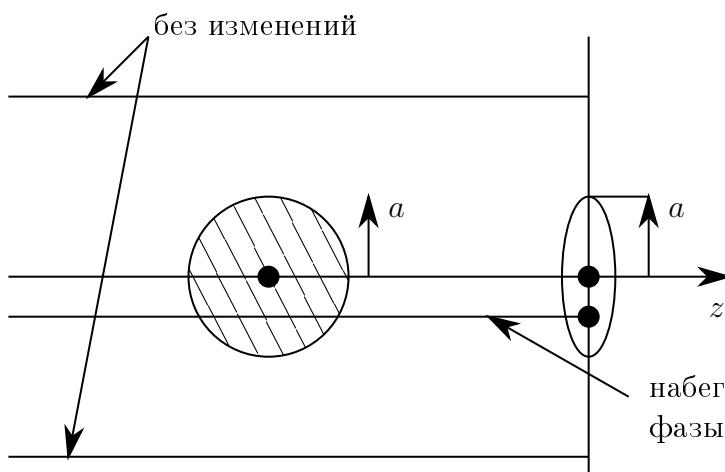


Рис. 12.7. Схема набега фазы у волны, проходящей через потенциал в случае рассеяния при высоких энергиях (аналогия с оптикой и прохождением оптической волны через среду с переменным показателем преломления)

неоднородную среду с изменяющимся показателем преломления. В нашем случае условие высокости энергии означает, что «коэффициент преломления» меняется слабо, значит потенциал невелик, а тогда можно записать:

$$\sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V(\rho, z)} \approx k - \frac{1}{2k} \cdot \frac{2m}{\hbar^2}V(\rho, z), \quad (12.24)$$

где второе слагаемое означает фазовый набег.

Таким образом, в месте после потенциала будет «пятно» с фазовым набегом (См. рис. 12.8).

Получаем из (12.22) с учётом (12.24), что решение будет иметь вид:

$$e^{ikz+2i\delta(\rho)} = e^{ikz} + \underline{e^{ikz}(e^{2i\delta(\rho)} - 1)} \quad (12.25)$$

Подчёркнутая в (12.25) часть даст расходящуюся сферическую волну, отличную от нуля в области, отмеченной на рис. 12.8.

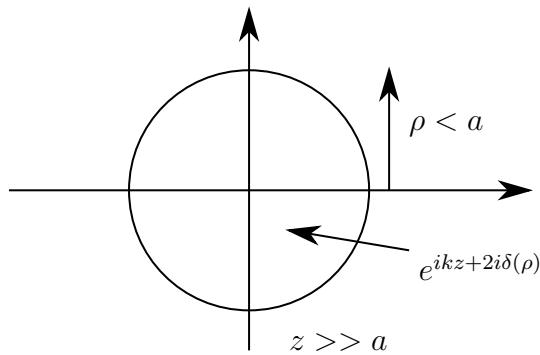


Рис. 12.8. Плоскость за потенциалом при $z \gg a$, на которой отмечена область, где фазовый набег отличен от нуля

Из (12.24) имеем:

$$2\delta(\rho) = -\frac{1}{2k} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\rho, z) dz \quad (12.26)$$

Для дальнейшего удобства решения перенесём начало координат по оси z в плоскость за потенциалом, где $z \gg a$. Зная решение в точке O и граничные условия (ψ, ψ') , на границе, нужно найти решение уравнения Гельмгольца через функцию Грина в произвольной точке плоскости достаточно далёкой от начала координат (См. рис. 12.9).

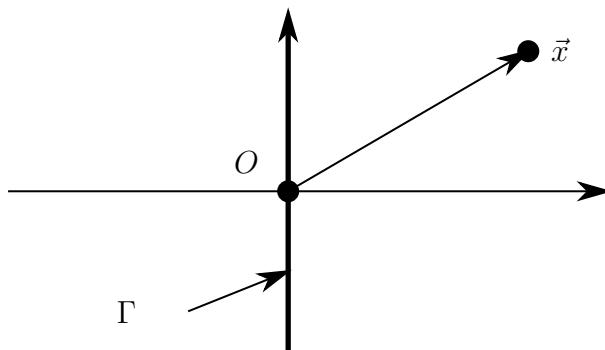


Рис. 12.9. Математическая постановка задачи. Граница Γ , на которой известны граничные условия

Итак, пусть $G(x, y)$ - функция Грина. Имеем некоторую область V , в которой нужно найти решение $(\psi(\bar{x}))$ с границей Γ , при известных граничных условиях (См. рис. 12.10).

Из уравнения Гельмгольца и граничных условий видим, что

$$(\Delta + k^2) \psi = 0 \Rightarrow \Delta_y \psi(\bar{y}) = -k^2 \psi(\bar{y}) \quad (12.27)$$

Также заметим, что

$$\Delta_y G_0(\bar{x}, \bar{y}) = \delta(\bar{x} - \bar{y}) - k^2 G_0(\bar{x}, \bar{y}) \quad (12.28)$$

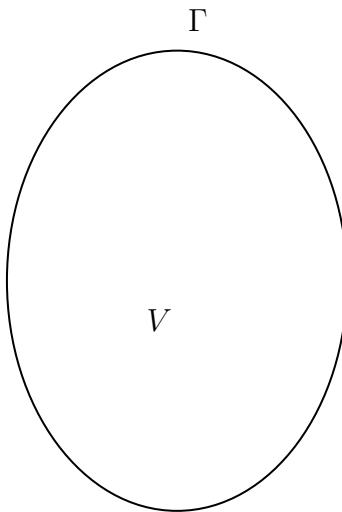


Рис. 12.10. Постановка задачи на поиск решения уравнения Гельмгольца с заданными граничными условиями

Проинтегрируем по V , с учётом (12.27) и (12.28), получим:

$$\begin{aligned}
 \int_V d\bar{y} \bar{\nabla}_y (\psi(\bar{y}) \bar{\nabla}_y G_0(\bar{x}, \bar{y}) - G_0(\bar{x}, \bar{y}) \bar{\nabla}_y \psi(\bar{y})) = \\
 = \int_{\Gamma} d\bar{s} [\psi(\bar{s}) \bar{\nabla}_s G_0(\bar{x}, \bar{s}) - G_0(\bar{x}, \bar{s}) \bar{\nabla}_s \psi(\bar{s})] = \dots = \\
 = \int_V d\bar{y} \left[\underbrace{\psi(\bar{y})}_{\delta(\bar{x}-\bar{y})-k^2 G_0(\bar{x}, \bar{y})} \underbrace{\Delta_y G_0(\bar{x}, \bar{y})}_{-k^2 \psi(\bar{y})} - G_0(\bar{x}, \bar{y}) \underbrace{\Delta_y \psi(\bar{y})}_{-k^2 \psi(\bar{y})} \right] = \\
 = \psi(\bar{x}) \quad (12.29)
 \end{aligned}$$

Таким образом, получим

$$\int_{\Gamma} d\bar{s} [\psi(\bar{s}) \bar{\nabla}_s G_0(\bar{x}, \bar{s}) - G_0(\bar{x}, \bar{s}) \bar{\nabla}_s \psi(\bar{s})] = \psi(\bar{x}) \quad (12.30)$$

Функция Грина в нашем случае имеет вид:

$$G_0(\bar{x}, \bar{y}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\bar{x}-\bar{y}|}}{|\bar{x}-\bar{y}|} \quad (12.31)$$

однако нас интересует её асимптотика:

$$G_0(\bar{x}, \bar{y})|_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \cdot e^{-i\bar{k}' \bar{y}}, \quad (12.32)$$

где $r = |\bar{x}|$; $\bar{k}' = \frac{\bar{x}}{|\bar{x}|} \cdot k$.

Поскольку вектор площади поверхности смотрит наружу, а в нашем случае влево, то это нужно учесть при взятии производной по z .

$$\bar{\nabla}_s \rightarrow -\frac{\partial}{\partial z} \quad (12.33)$$

Поскольку из-за симметрии задачи, \bar{k}' не зависит от φ , то вторую координату этого вектора можно взять нулевой:

$$\bar{k}' = k(\sin \theta, 0, \cos \theta) \quad (12.34)$$

С учётом всего вышесказанного получим:

$$\begin{aligned} \psi(x)|_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} &= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \cdot \\ &\cdot \int \rho d\rho d\varphi \cdot \left[e^{ikz} (e^{2i\delta(\rho)} - 1) \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot e^{-ik \sin \theta \cdot \rho \cos \varphi - \dots} \dots \right] \end{aligned} \quad (12.35)$$

Лекция 13

Рассеяние при высоких энергиях

Итак, мы получили такую картину (См. рис. 13.1): когда плоская волна падает на локальный потенциал, то при прохождении через область потенциала у волновой функции происходит набег фазы. Тогда в случае высоких энергий в плоскости

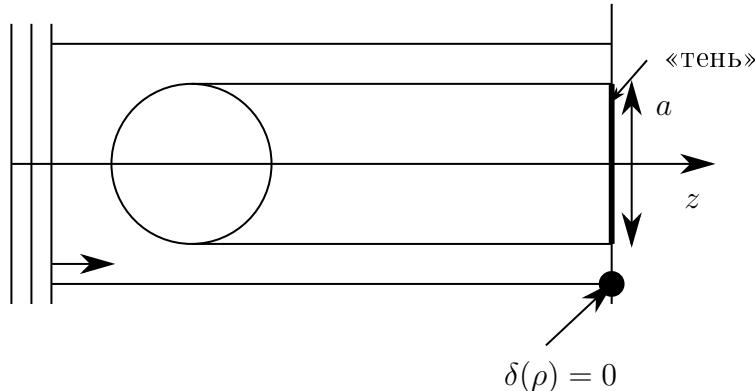


Рис. 13.1. Плоская волна налетает на область действия потенциала, в результате в области «тени» волновая функция испытывает набег фазы, в других областях набег фазы равен нулю

далеко за потенциалом волновая функция налетающих частиц имеет вид:

$$e^{ikz} + e^{ikz} (e^{2i\delta(\rho)} - 1) \quad (13.1)$$

Из этой «тени», в которой $\delta(\rho)$ отлична от нуля будет расходится сферическая волна. Вспомним, что:

$$2\delta(\rho) = -\frac{1}{2\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\rho, x) dz \quad (13.2)$$

Из краевой задачи для уравнения Гельмгольца имеем:

$$\psi(x) = \int d\bar{s} [\psi(\bar{s}) \bar{\nabla}_s G_0(\bar{x}, \bar{s}) - G_0(\bar{x}, \bar{s}) \bar{\nabla}_s \psi(\bar{s})] \quad (13.3)$$

Нас интересует решение при $|\bar{x}| \rightarrow \infty$, где

$$G_0(\bar{x}, \bar{y})|_{|\bar{x}|=r \rightarrow \infty} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\bar{k}' \bar{y}}, \quad (13.4)$$

где

$$\bar{k}' = \frac{\bar{x}}{|\bar{x}|} \cdot k \quad (13.5)$$

Так как задача обладает цилиндрической симметрией, то можно взять то направление наблюдение, которое нам удобно (\bar{x} и \bar{k}'), поэтому:

$$\bar{k}' = k(\sin \theta, 0, \cos \theta) \quad (13.6)$$

Для удобства можно перенести начало координат по оси z , чтобы занулить соответствующую координату, но только после дифференцирования по z . Таким образом, имеем:

$$\begin{aligned} \psi(\bar{x})|_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} &= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \cdot \int_{\Gamma} \rho d\rho d\varphi [e^{ikz} \cdot (e^{2i\delta(\rho)} - 1) \cdot \\ &\quad \underbrace{\left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)}_{=ik \cos \theta} \cdot e^{-ik \sin \theta \cdot \rho \cos \theta - ik \cos \theta \bar{z}} - \\ &\quad - e^{-ik \sin \theta \cdot \rho \cos \varphi - ik \cos \theta \bar{z}} \cdot \underbrace{\left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)}_{=-ik} e^{ikz} \cdot (e^{2i\delta(\rho)} - 1)] \Rightarrow \\ &\Rightarrow f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \cdot \int \rho d\rho d\varphi \cdot ik(1 + \cos \theta) e^{-ik \rho \sin \theta \cos \varphi} \cdot (e^{2i\delta(\rho)} - 1) \quad (13.7) \end{aligned}$$

Поскольку

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm iz \cos \varphi} d\varphi = 2\pi J_0(z), \quad (13.8)$$

где J_0 - функция Бесселя нулевого порядка, то имеем:

$$f(\theta) = \int_0^\infty 2k\rho k d\rho \cdot J_0(k\rho \sin \theta) \cdot \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta(\rho)} - 1) \frac{1 + \cos \theta}{2} \quad (13.9)$$

Заметим, что найти полное сечение рассеяния можно проще. Из оптической теоремы имеем:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \text{Im}\{f(\theta = 0)\} \quad (13.10)$$

Тогда, с учётом (13.9), имеем:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty 2k\rho k d\rho \cdot 1 \cdot \frac{1}{2k} [1 - \cos(2\delta(\rho))] \cdot 1 \quad (13.11)$$

Из (13.9) можно сделать следующие выводы:

- 1) Поскольку энергия частиц большая, а J_0 - осциллирующая функция, то интегрирование $J_0(k\rho \sin \theta)$ по ρ ($0 \leq \rho \leq a$) при больших $k \sin \theta$ занулит соответствующий интеграл, следовательно при высоких энергиях рассеяние происходит на небольшие углы, то есть $\theta \lesssim \frac{1}{ka}$.
- 2) Выражение (13.9) представляет собой парциальное разложение.

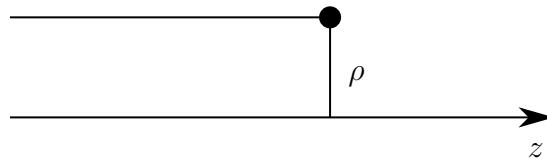


Рис. 13.2. Траектория частицы, пролетающей с прицельным параметром ρ . Полуклассическая картина

Убедимся во втором выводе. При больших $k\rho$ и малых θ имеем:

$$J_0(k\rho \sin \theta) = P_l(\cos \theta), \quad (13.12)$$

где $l \equiv k\rho$.

Нетрудно понять, почему можно отождествить l и $k\rho$ (См. рис. 13.2). Из рис. 13.2 видим, что момент импульса («импульс на плечо»):

$$l = \frac{1}{\hbar} p \cdot \rho = k\rho \quad (13.13)$$

Тогда $kd\rho = dl$; $2k\rho = 2l$, а при больших $k\rho$:

$$2k\rho \approx (2l + 1) \quad (13.14)$$

Таким образом, имеем:

$$f(\theta) \approx \int_0^{\infty} (2l + 1) dl \cdot P_l(\cos \theta) \cdot \underbrace{\frac{1}{2ik} (e^{2i\delta(\rho)} - 1)}_{f_l} = \sum_{l=0}^{\infty} \dots, \quad (13.15)$$

если считать, что $\delta(\rho) = \delta_l$.

Теория переходов

Представление Дирака (Представление взаимодействия)

До данного момента динамика квантовых систем описывалась нами двумя представлениями (пусть системы консервативные, а наблюдаемые не зависят от времени):

1) Представление Гейзенберга (ПГ):

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_{\Gamma}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_{\Gamma}(t)] \quad (13.16)$$

$$\rho_{\Gamma}(t) \equiv \rho_{\Gamma}(0) \quad (13.17)$$

В чистых состояниях:

$$|\psi_{\Gamma}(t)\rangle = |\psi_{\Gamma}(0)\rangle \quad (13.18)$$

2) Представление Шрёдингера (ПШ):

$$\hat{A}_{\text{Ш.}}(t) \equiv \hat{A}_{\text{Ш.}}(0) \quad (13.19)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{\text{Ш.}}(t) = [\hat{H}, \rho_{\text{Ш.}}(t)] \quad (13.20)$$

В чистых состояниях:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_{\text{Ш.}}\rangle = \hat{H} |\psi_{\text{Ш.}}\rangle \quad (13.21)$$

Связь этих представлений:

$$\hat{A}_{\Gamma.}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A}_{\text{Ш.}}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad (13.22)$$

Для состояний:

$$\rho_{\text{Ш.}}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \rho_{\Gamma.}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}; \quad (13.23)$$

$$|\psi_{\text{Ш.}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_{\Gamma.}(t)\rangle \quad (13.24)$$

Представление Дирака лежит где-то на полпути от ПШ к ПГ. Пусть система не консервативная, и

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t), \quad (13.25)$$

где \hat{H}_0 нам известен, тогда волновая функция в представлении Дирака (ПД) имеет вид:

$$|\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle \equiv e^{+\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\psi_{\text{Ш.}}(t)\rangle, \quad (13.26)$$

а оператор:

$$\hat{A}_{\text{Д.}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \cdot \hat{A}_{\text{Ш.}}(t) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \quad (13.27)$$

В представлении Дирака для операторов дифференциальные уравнения как правило не пишутся. В отсутствии \hat{H}_I дираковская волновая функция не эволюционирует.

Напишем дифференциальное уравнение для волновой функции в представлении Дирака:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_{\text{Д.}}\rangle &= \cancel{e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \left(-\hat{H}_0 \right)} \cdot |\psi_{\text{Ш.}}\rangle + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \left(\cancel{\hat{H}_0} + \hat{H}_I(t) \right) \cdot \underbrace{1}_{e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}} \cdot |\psi_{\text{Ш.}}\rangle = \\ &= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{H}_I(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t}}_{\hat{H}_{I_{\text{Д.}}}(t)} \cdot \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\psi_{\text{Ш.}}\rangle}_{|\psi_{\text{Д.}}\rangle} \quad (13.28) \end{aligned}$$

Таким образом, имеем:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle = \hat{H}_{I_{\text{Д.}}}(t) |\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle \quad (13.29)$$

Нестационарная теория возмущений (НТВ)

Пусть система находится в чистом состоянии $|\psi_n\rangle$, причём:

$$\hat{H}_0 |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle \quad (13.30)$$

Пусть далее к гамильтониану \hat{H}_0 включили добавку $\hat{H}_I(t)$. Нас интересует, с какой вероятностью система перейдёт в состояние $|\psi_m\rangle$ при $m \neq n$.

Такую задачу удобно решать в представлении Дирака. Имеем:

$$|\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle \equiv \sum_k c_k(t) |\psi_k\rangle \quad (13.31)$$

Подставим (13.31) в (13.29), получим:

$$\sum_k i\hbar \dot{c}_k |\psi_k\rangle = \hat{H}_{I_{\text{Д.}}}(t) \sum_l c_l(t) |\psi_l\rangle \quad (13.32)$$

домножим (13.32) слева на $\langle \psi_m |$, тогда:

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_l \langle \psi_m | \hat{H}_{I_{\text{Д.}}}(t) | \psi_l \rangle \cdot c_l \quad (13.33)$$

Вернёмся в ПШ:

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | \hat{H}_{I_{\text{Д.}}}(t) | \psi_l \rangle &= \left\langle \underline{\underline{\psi_m}} \middle| e^{\frac{i}{\hbar} \underline{\underline{\hat{H}_0 t}}} \hat{H}_{I_{\text{III.}}}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \underline{\underline{\hat{H}_0 t}}} \underline{\underline{\psi_l}} \right\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} (E_m - E_l)t} \langle \psi_m | \hat{H}_{I_{\text{III.}}}(t) | \psi_l \rangle \equiv \\ &\equiv e^{i\omega_{ml}t} \cdot V_{ml}(t) \end{aligned} \quad (13.34)$$

Тогда:

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_l e^{i\omega_{ml}t} V_{ml}(t) c_l(t) \quad (13.35)$$

Пусть теперь \hat{H}_I - «маленький», тогда раскладываем по степеням:

$$c_m(t) = c_m^{(0)}(t) + c_m^{(1)}(t) + \dots \quad (13.36)$$

Применимость НТВ выясняется постфактум, если в итоге выполняется:

$$c_m^{(k+1)} \ll c_m^{(k)} \quad (13.37)$$

В нулевом приближении имеем:

$$i\hbar \dot{c}_m^{(0)} = 0 \Rightarrow c_n^{(0)} = 1; \quad c_{m \neq n}^{(0)} = 0 \quad (13.38)$$

$$i\hbar \dot{c}_m^{(1)} = \sum_l e^{i\omega_{ml}t} V_{ml}(t) c_l^{(0)} t \quad (13.39)$$

$$i\hbar \dot{c}_m^{(s+1)} = \sum_l e^{i\omega_{ml}t} V_{ml}(t) c_l^{(s)} t \quad (13.40)$$

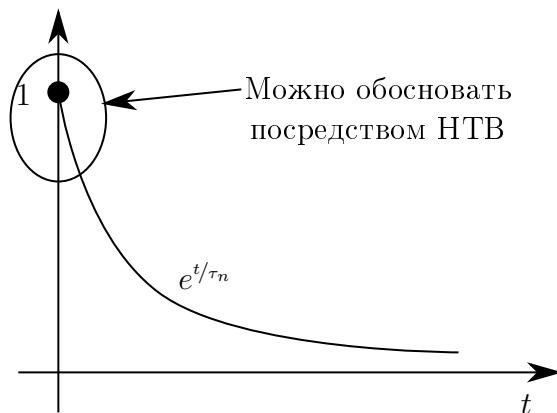


Рис. 13.3. Рисунок зависимости нормированного числа распадающихся атомов от времени. Обозначена область применения НТВ

С учётом (13.38) можно переписать (13.39) в виде:

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{(0 \text{ или } -\infty)}^t dt e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t) \quad (13.41)$$

Замечание

На ранних этапах распада атомы распадаются согласно закону распада (экспоненциально) (См. рис. 13.3).

Обосновать экспоненциальную зависимость посредством НТВ можно только в самом начале распада, с течением времени распад начинает принимать не экспоненциальный, а полиномиальный характер.

Рассмотрим некоторые задачи, которые решаются с помощью НТВ. В их число входят адиабатические переходы, мгновенные переходы и переходы под действием периодического возмущения.

Поставим следующую задачу (См. рис. 13.4) в прошлом (на $-\infty$) система с гамильтонианом \hat{H}_0 находилась в каком-то состоянии $|\psi_n\rangle$. Потом в какой-то момент времени (близкий к нулю) в \hat{H}_0 «включился» \hat{H}_I (потом он может и выключиться, что отмечено пунктиром, но мы этого не рассматриваем) и за какое-то характерное время τ \hat{H}_I «включился полностью». Тогда у системы будет гамильтониан $\hat{H}_0 + \hat{H}_I$ со своими состояниями $|\psi'_k\rangle$. Зададимся вопросом: какова вероятность того, что в результате система окажется в одном из новых состояний $|\psi'_k\rangle$?

По характерному времени перехода τ они делятся на адиабатические:

$$\tau >> \frac{1}{\omega_{mn}} \quad (13.42)$$

и мгновенные:

$$\tau << \frac{1}{\omega_{mn}} \quad (13.43)$$

В (13.42), (13.43) n - фиксировано, а m - нет.

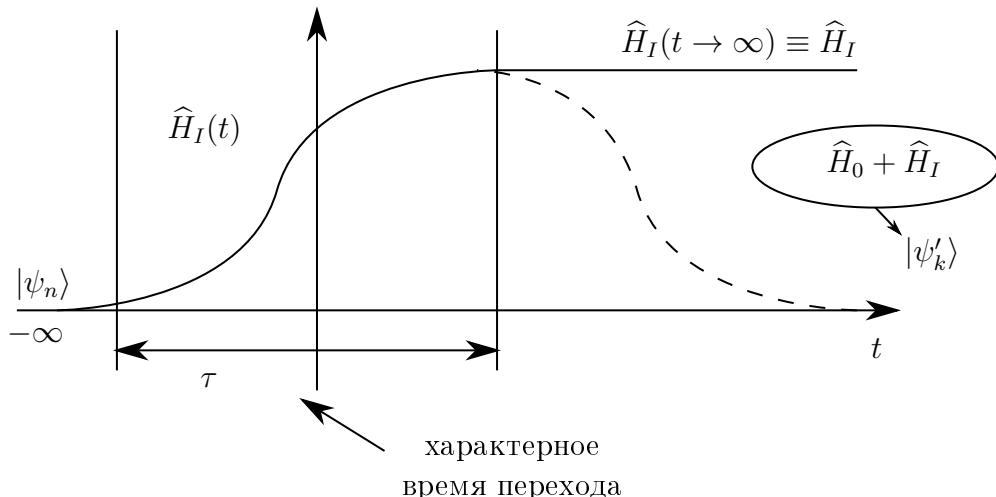


Рис. 13.4. Схематическое изображение переходного процесса

Адиабатические переходы (АП)

Имеем:

$$\begin{aligned} c_m(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t) dt = \left[e^{i\omega_{mn}t} dt = d \left(\frac{e^{i\omega_{mn}t}}{i\omega_{mn}} \right) \right] = \\ &= \frac{1}{i\hbar i\omega_{mn}} e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t) \Big|_{-\infty}^t - \frac{1}{E_n - E_m} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{mn}t} V'_{mn}(t) dt, \quad (13.44) \end{aligned}$$

где V'_{mn} очевидно отличен от нуля на интервалах времени порядка τ .

При условии адиабатичности:

$$\omega_{mn}\tau \gg 1 \quad (13.45)$$

интеграл в (13.44) зануляется (См. рис. 13.5).

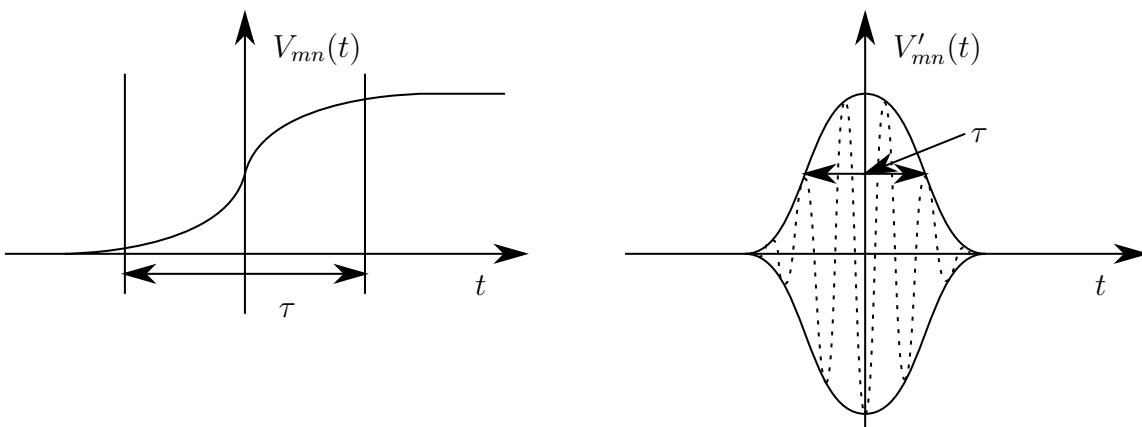


Рис. 13.5. Слева схематичное изображение $V_{mn}(t)$, справа - огибающая V'_{mn} и её заполнение (подынтегральное выражение в (13.44))

Таким образом, после взятия интеграла (13.44) по частям в этом выражении остаётся только первое слагаемое, получаем:

$$c_m(t) = \frac{1}{E_n - E_m} V_{mn}(t) \cdot e^{i\omega_{mn} t} \quad (13.46)$$

Пусть (возьмём сперва для удобства):

$$V_{nn}(t) \equiv 0 \quad (13.47)$$

Вернёмся в ПШ:

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{III.}}(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} |\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \left[\underbrace{|\psi_n\rangle}_{\text{нул. приб.}} + \sum_{m \neq n} c_m^{(1)}(t) |\psi_m\rangle \right] = \\ &= \left[e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{E}_n t} \cdot |\psi_m\rangle + \sum_{m \neq n} e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{E}_m t} |\psi_m\rangle \cdot \frac{1}{E_n - E_m} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{E}_m - \underline{E}_n)t} V_{mn}(t) \right] \quad (13.48) \end{aligned}$$

Лекция 14

Теория переходов

Адиабатические переходы (АП)

Итак, в ПШ волновая функция имеет вид:

$$\begin{aligned}
 |\psi_{\text{Ш.}}(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\psi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}(t) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t}}{\hbar\omega_{nm}} \cdot |\psi_m\rangle \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} = \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \left[|\psi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}(t)}{E_n - E_m} \cdot |\psi_m\rangle \right] = \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \underbrace{\left[|\psi_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle\psi_m|\hat{H}_I(t)|\psi_n\rangle}{E_n - E_m} \cdot |\psi_m\rangle \right]}_{\text{ВФ с поправкой из стац. ТВ}} = e^{-\frac{i}{\hbar}E'_n t} |\psi'_n\rangle \quad (14.1)
 \end{aligned}$$

Получили поправку к волновой функции. Поскольку $V_{nn}(t) \equiv 0$, то

$$\langle\psi_n|\hat{H}_I(t)|\psi_n\rangle = 0 = E_n^{(1)} \quad (14.2)$$

Таким образом, при $V_{nn}(t) = 0$ поправки к уровню энергии нет, это значит, что:

$$E_n^{(1)} = 0 \Rightarrow E'_n \equiv E_n \quad (14.3)$$

Рассмотрим выкинутый интеграл из (13.44), чтобы убедиться в справедливости его зануления. Поскольку $V'_{mn}(t)$ - гладко меняющаяся функция, а $e^{i\omega_{mn}t}$ - быстро осциллирующая, то:

$$\int_{-\infty}^t \frac{V'_{mn}(t)}{\hbar\omega_{nm}} e^{i\omega_{mn}t} dt \sim \frac{V'_{mn}(t)}{\hbar\omega_{nm}} \cdot \frac{1}{\omega_{mn}} \sim \frac{V_{mn}/\tau}{\hbar\omega_{mn}} \cdot \frac{1}{\omega_{mn}} \sim \underbrace{\frac{V_{mn}}{\hbar\omega_{mn}}}_{<<1 \text{ (усл. ТВ)}} \cdot \underbrace{\frac{1}{\omega_{mn}\tau}}_{<<1 \text{ (усл. адиаб.)}} \quad (14.4)$$

Таким образом, при АП можно считать, что перехода не происходит (в нулевом приближении), то есть: пусть имеется гамильтониан $\hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)$. Запишем для него стационарное уравнение Шрёдингера:

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)) |\psi_n(t)\rangle = E_n(t) |\psi_n(t)\rangle \quad (14.5)$$

В общем случае, уравнение (14.5) не имеет физического смысла, поскольку состояния $|\psi_n(t)\rangle$ не являются стационарными. Но в случае адиабатического перехода уровень энергии в нулевом приближении не меняется, и при условии адиабатичности волновая функция эволюционирует, как

$$\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}_{=e^{-\frac{i}{\hbar}E'_n t}} \cdot |\psi'_n(t)\rangle, \quad (14.6)$$

где $|\psi'_n(t)\rangle$ есть решение уравнения (14.5). Значит, в случае АП можно было воспользоваться адиабатической теорией возмущений: решая мгновенное уравнение Шрёдингера, пользуясь малыми производными по времени, получаем нулевое приближение адиабатической теории возмущений. Частица остаётся на n -й уровне энергии, а её энергия и волновая функция чуть-чуть сдвигаются.

Мгновенные переходы (МП)

Рассмотрим случай, когда \hat{H}_I «включается» мгновенно (См. рис. 14.1).

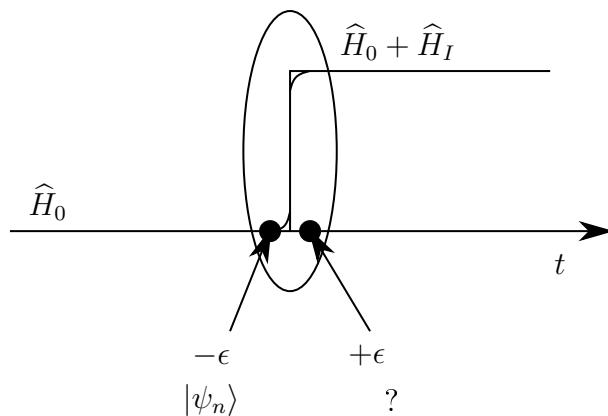


Рис. 14.1. Иллюстрация мгновенного перехода, ϵ мало и стремится к нулю

Известно состояние системы до «включения» $-\epsilon$, найдём состояние при $+\epsilon$. Воспользуемся нестационарным уравнением Шрёдингера (проинтегрируем его). Если $\hat{H}(t)$ не содержит δ -функций, то:

$$i\hbar [|\psi(+\epsilon)\rangle - |\psi(-\epsilon)\rangle] = \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle dt = 0 \quad (14.7)$$

Значит сразу после скачка волновая функция не изменится:

$$|\psi(+\epsilon)\rangle = |\psi(-\epsilon)\rangle = |\psi_n\rangle \quad (14.8)$$

Выражение (14.8) называется принципом Кондона.

Вероятность того, что система окажется в каком-то состоянии при новом гамильтониане:

$$P_{|\psi'_k\rangle} \equiv |\langle\psi'_k|\psi_n\rangle|^2 \quad (14.9)$$

Такой же ответ даст нестационарная теория возмущений.

Переходы под действием периодического возмущения (ПВ)

Имеем гамильтониан возмущения:

$$\hat{H}_I(t) = H_I \cdot e^{-\Omega t} + \cancel{H_I^+ e^{i\Omega t}} \quad (14.10)$$

Два слагаемых в (14.10) соответствуют физически противоположным процессам, которые обычно одновременно не происходят, поэтому будем рассматривать только с первым слагаемым.

Замечание

Ω может быть равным нулю.

Имеем

$$c_m^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i\omega_{mn} t} \cdot \langle \psi_m | H_I e^{-i\Omega t} | \psi_n \rangle dt \quad (14.11)$$

Введём обозначения:

$$\langle \psi_m | H_I | \psi_n \rangle \equiv V_{mn} \quad (14.12)$$

$$\omega_{mn} - \Omega \equiv \Delta \quad (14.13)$$

Теперь зафиксируем « $\pm\infty$ » каким-нибудь большим T , которое затем устремим к ∞ (См. рис. 14.2).

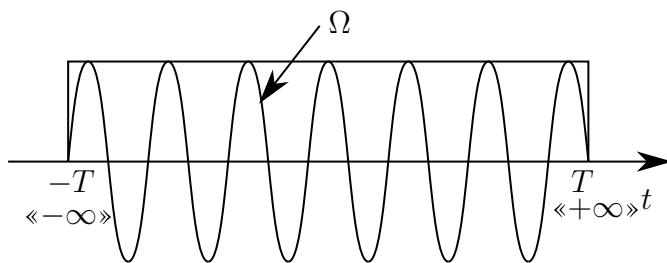


Рис. 14.2. Фиксация интервала времени, края которого потом устремлятся к бесконечности

Найдём коэффициенты для волновой функции в момент времени после T :

$$c_m^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-T}^T V_{mn} e^{i\Delta t} dt = \frac{V_{mn}}{i\hbar} \frac{e^{i\Delta T} - e^{-i\Delta T}}{i\Delta} = \frac{V_{mn}}{i\hbar} \cdot \frac{2}{\Delta} \sin(\Delta T) \quad (14.14)$$

Нас интересует наступает ли резонанс. Если $\omega_{mn} = \Omega$, то коэффициент линейно растёт. Вычислим скорость перехода. Вероятность:

$$P_{n \rightarrow m} = |c_m|^2; \quad (14.15)$$

скорость перехода:

$$v_m = \frac{|c_m|^2}{2T} = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta T)}{\Delta^2 T} \cdot 2 \quad (14.16)$$

При $T \rightarrow \infty$ если $\Delta = 0$, то:

$$v_m \rightarrow \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{\Delta^2 T^2}{\Delta^2 T} \rightarrow \infty; \quad (14.17)$$

Если $\Delta \neq 0$, то:

$$v_m = \frac{|V_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\Delta T)}{\Delta^2 T} \rightarrow 0 \quad (14.18)$$

То есть:

$$T \rightarrow \infty \left\{ \begin{array}{l} \Delta = 0 \rightarrow \infty \\ \Delta \neq 0 \rightarrow 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \delta\text{-функция} \quad (14.19)$$

Имеем:

$$\int d\Delta T \frac{\sin^2(\Delta T)}{\Delta^2 T^2} = \int dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \pi \quad (14.20)$$

Интеграл в (14.20) проще всего взять с помощью вычетов:

$$\int dx \frac{\sin^2 x}{x^2 + \xi^2}, \quad (14.21)$$

где $\xi \rightarrow 0$.

Итак:

$$\left. \frac{\sin^2(\Delta T)}{\Delta^2 T} \right|_{T \rightarrow \infty} = \pi \delta(\Delta) \quad (14.22)$$

Значит

$$v_m = \frac{2\pi}{\hbar^2} |V_{mn}|^2 \cdot \delta(\Delta) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{mn}|^2 \cdot \delta(\hbar\Delta) \quad (14.23)$$

Таким образом, учитывая (14.13), скорость распада уровня:

$$v_n \equiv \frac{1}{\tau_n} \equiv \sum_{m \neq n} v_m = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m \neq n} |\langle \psi_m | H_I | \psi_m \rangle|^2 \cdot \delta(E_m - (E_n + \hbar\Omega)) = \frac{1}{\tau} \quad (14.24)$$

Формула (14.24) называется золотым правилом Ферми, или формулой для скорости перехода в непрерывный спектр.

В дискретном спектре конечного состояния (14.24) не имеет смысла, поскольку скорость либо равна нулю, либо бесконечна. Чтобы придать ей смысл, нужно предполагать, что то, куда переходит система, лежит в непрерывном спектре. То есть нужно перейти от суммы к интегрированию.

Покажем это на иллюстрации (См. рис. 14.3).

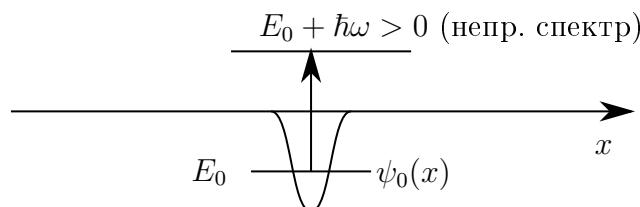


Рис. 14.3. Частица в одномерной потенциальной яме

Когда на систему начинает действовать гамильтониан $H_I \cdot e^{-i\Omega t} \equiv f(x)e^{-i\Omega t}$, уровень энергии поднимается выше нуля (где непрерывный спектр), и частица сможет выйти из ямы.

Замечание

Такие задачи всегда решаются приближённо, так как честно решить уравнение Шрёдингера не получится, поэтому в них решение аппроксимируется плоскими волнами. Считаем, что после воздействия, состояние системы представляет плоскую волну $|\psi_m\rangle$. Но $|\psi_m\rangle$ - дискретный спектр, значит непрерывный спектр, которому соответствует (14.24), нужно сделать дискретным. Для этого считаем, что пространство - конечно (См. рис. 14.4).

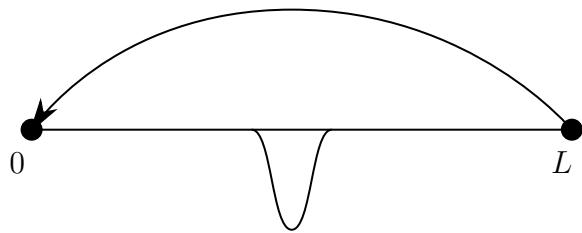


Рис. 14.4. Большой интервал длины L с периодическими граничными условиями на краях (L отождествляется с 0)

Тогда:

$$|\psi_m\rangle = \frac{e^{ik_m x}}{\sqrt{L}} \quad (14.25)$$

потом $L \rightarrow \infty$. На границы можно накладывать любые условия, но проще сделать их периодическими. Условие периодичности:

$$k_m = \frac{2\pi}{L} \cdot m \quad (14.26)$$

Чтобы перейти от интегрирования к суммированию имеем:

$$\int dk \equiv \frac{2\pi}{L} \sum_m \quad (14.27)$$

Таким образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{\sum_m}_{\sum} \int dk \cdot \left| \underbrace{\int dx \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{L}} \cdot f(x) \psi_0(x)}_{F(k)} \right|^2 \cdot \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \underbrace{(E_0 + \hbar\Omega)}_{\frac{\hbar^2}{2m} k_0^2} \right) = \\ &= \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{1}{\frac{\hbar^2}{2m} 2k_0} [|F(k_0)|^2 + |F(-k_0)|^2], \quad (14.28) \end{aligned}$$

где нетрудно понять, что $|F(k_0)|^2$ отвечает за то, что частица из ямы выскочит вправо, а $|F(-k_0)|^2$ - за то, что влево.

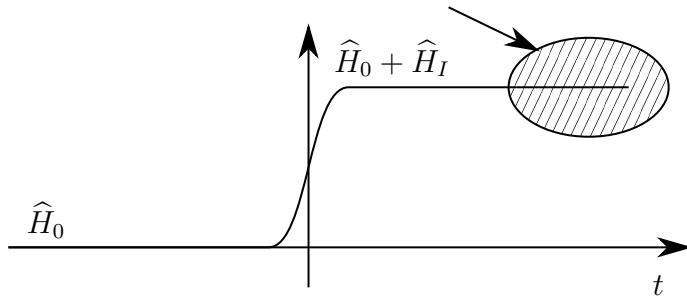


Рис. 14.5. Иллюстрация перехода. Отмечена область, в которой рассматривается система

Случай, когда $V_{nn}(t) \neq 0$

Пусть $V_{mn}(t) = 0$. Рассмотрим систему в момент времени, когда переход уже состоялся (См. рис. 14.5).

Тогда имеем по прежнему:

$$c_n^{(0)}(t) = 1 \quad (14.29)$$

$$c_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \underbrace{V_{nn}(t)}_{\langle \psi_n | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \equiv E_n^{(1)}} \cdot e^{i\omega_{nn}t} dt \quad (14.30)$$

Далее

$$\dot{c}_n^{(1)}(t) \sim \frac{1}{i\hbar} E_n^{(1)} \quad (14.31)$$

Значит при $t \rightarrow \infty$ имеем:

$$c_n^{(1)}(t) = i\varphi_0 - \frac{i}{\hbar} E_n^{(1)} t, \quad (14.32)$$

где φ_0 постоянная. Тогда волновая функция, с учётом поправок будет иметь вид:

$$|\psi_{\text{д.}}(t)\rangle = |\psi_n\rangle + \underbrace{\left(i\varphi_0 - \frac{i}{\hbar} E_m^{(1)} t\right)}_{<<1 \text{ (по усл. примен. ТВ)}} |\psi_n\rangle = e^{i\varphi_0 - \frac{i}{\hbar} E_n^{(1)} t} |\psi_n\rangle \quad (14.33)$$

Перейдём в ПШ:

$$|\psi_{\text{ш.}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} |\psi_{\text{д.}}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n + E_n^{(1)}) t + i\varphi_0} |\psi_n\rangle, \quad (14.34)$$

где $E_n + E_n^{(1)} = E'_n$, а φ_0 имеет смысл фазового набега, связанного с историей системы (так, как росло возмущение).

Получить случай, когда $V_{mn} \neq 0$ несложно, но там нужно будет учесть порядки малости:

$$|\psi_n\rangle + |\psi_n^{(1)}\rangle \\ |\psi_n^{(1)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \equiv |\psi_n^{(1)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E'_n t}$$

Функция Грина и эволюция системы

Построение функции Грина делается следующим образом:

$$G(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\epsilon} = \sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E - E_n + i\epsilon}, \quad (14.35)$$

где $i\epsilon$ в знаменателе вводится для обхода полюсов.

Полюса функции Грина - это дискретные уровни энергии, сдвинутые чуть ниже, чем вещественная ось:

$$E = E_n - i\epsilon \quad (14.36)$$

В случае если у системы помимо дискретного спектра есть непрерывный, у функции Грина появляется добавок:

$$G(E) = \frac{1}{E - \hat{H} + i\epsilon} = \sum_n \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E - E_n + i\epsilon} + \int d\Theta \frac{|\psi_\Theta\rangle \langle \psi_\Theta|}{E - \Theta + i\epsilon}, \quad (14.37)$$

где $i\epsilon$ в интеграле - это разрезы, так как

$$\int dx \frac{1}{x} \sim \ln x, \quad (14.38)$$

а у логарифма - разрезы.

Мы будем считать, что весь спектр - дискретный (иначе мы просто перейдём из дискретного в непрерывный, как в (14.27)).

Вспомним, что:

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} Et}}{E - E_n + i\epsilon} = -\frac{1}{2\pi i} (-2\pi i) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad (14.39)$$

Выбираем правильный путь для замыкания контура (если выбрать верхний, то экспонента будет бесконечно возрастать) (См. рис. 14.6).

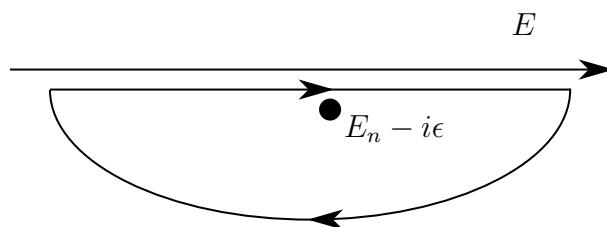


Рис. 14.6. Правильный путь для замыкания контура

Итак, учитывая (14.35), (14.39), имеем:

$$-\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar} Et} G(E) = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad (14.40)$$

Из (14.40) видим, что зная функцию Грина системы можно получить её оператор эволюции.

Постановка задачи имеет следующий вид. Имеем $|\psi_n\rangle$ и функцию Грина, из которой:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} |\psi_n\rangle \quad (14.41)$$

Зададимся вопросами: с какой вероятностью система останется на n -м уровне, и с какой вероятностью она перейдёт с n -го уровня на m -й?

Имеем:

$$\langle \psi_m | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi_m \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \right| \psi_n \right\rangle \quad (14.42)$$

$$\langle \psi_n | \psi(t) \rangle = \left\langle \psi_n \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \right| \psi_n \right\rangle \quad (14.43)$$

Пусть $\hat{H} = \hat{H}_0$ - известен, тогда:

$$\left\langle \psi_m \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \psi_n \right\rangle = -\frac{\delta_{nm}}{E - E_n + i\epsilon} \quad (14.44)$$

Лекция 15

Теория переходов

Функция Грина и эволюция системы

Итак

$$G(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon}, \quad (15.1)$$

где \hat{H}_0 - известный гамильтониан, то есть известны его собственные вектора:

$$\hat{H}_0 |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle \quad (15.2)$$

Тогда

$$\langle \psi_m | G(E) | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \quad (15.3)$$

Если вначале система находилась в состоянии $|\psi_n\rangle$, то

$$\begin{aligned} c_m(t) &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \langle \psi_m | G(E) | \psi_n \rangle = \delta_{mn} \cdot \left(-\frac{1}{2\pi i} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar} Et}}{E - E_n + i\epsilon} dE = \\ &= \delta_{mn} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |\psi_n\rangle \end{aligned} \quad (15.4)$$

Пусть теперь гамильтониан представляет собой: $\hat{H}_0 + \hat{H}_I$, тогда полюс функции Грина сдвинется (См. рис. 15.1).

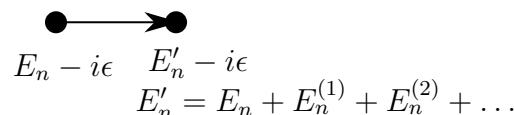


Рис. 15.1. Смещение полюса функции Грина при добавке к гамильтониану \hat{H}_I

Но полюс может также начать распадаться. Из золотого правила Ферми:

$$\frac{1}{\tau_n} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m \neq n} |\langle \psi_m | H_I | \psi_n \rangle|^2 \cdot \delta(E_m - (E_n + \hbar\Omega)), \quad (15.5)$$

где $\hbar\Omega$ зачёркнуто поскольку мы имеем дело с консервативной системой, так что (15.5) имеет смысл, только если энергия начального состояния и энергия конечного состояния непрерывного спектра одинаковы. Такое возможно в составной системе. Покажем это на иллюстрации (См. рис. 15.2).

Имеем частицу, которая находится в потенциальной яме на дискретном уровне E_0 в состоянии $\psi_0(x)$. Если прибавить к ней энергию $\hbar\Omega$ то она выйдет из ямы и попадёт на уровень $E_k = E_0 + \hbar\Omega$ непрерывного спектра, состояние которого нужно аппроксимировать плоскими волнами. Поскольку мы рассматриваем консервативную систему, то, чтобы добавить к частице в яме нужную энергию (См. рис. 15.2),

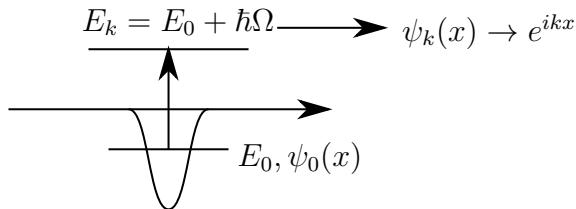


Рис. 15.2. Частица, находящаяся в потенциальной яме дискретного спектра

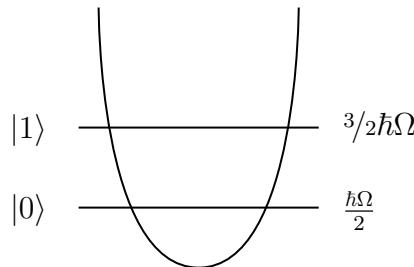


Рис. 15.3. Частица в гармоническом осцилляторе

присоединим к системе ещё одну частицу в гармоническом осцилляторе с частотой $\hbar\Omega$ (См. рис. 15.3). Из гармонического осциллятора можно будет взять энергию, нужную частице в яме, чтобы выпрыгнуть. Итак, пусть начальное состояние системы

мы

$$|\psi_n\rangle = |1\rangle \psi_0(x), \quad (15.6)$$

а конечное:

$$|\psi_m\rangle = |0\rangle \psi_k(x) \quad (15.7)$$

убедимся, что в этом случае уровень энергии конечного состояния непрерывного спектра будет равен уровню энергии начального состояния дискретного спектра. Поскольку система консервативна, то:

$$E_n = \frac{3}{2}\hbar\Omega + E_0 = E_m = \frac{1}{2}\hbar\Omega + E_k \quad (15.8)$$

Как и предполагалось, получаем из (15.8):

$$E_k = E_0 + \hbar\Omega \quad (15.9)$$

Если $\langle\psi_m|H_I|\psi_n\rangle \neq 0$, то переход будет происходить. Если H_I не будет включён в гамильтониан, то ψ_n - настоящий дискретный уровень, который не распадается. Если же H_I включён и равен, например, $H_I \rightarrow W(x, y)$, то $|\psi_n\rangle$ начнёт распадаться.

В таком случае, полюс функции Грина в добавок к смещению ещё сдвинется вниз (См. рис. 15.4) и станет:

$$E'_n - \frac{i}{2}\Gamma_n \quad (15.10)$$

Вспомним полюса амплитуды рассеяния для дискретных (ДУ), виртуальный (ВУ) и метастабильных (МУ) уровней (См. рис. 15.5).

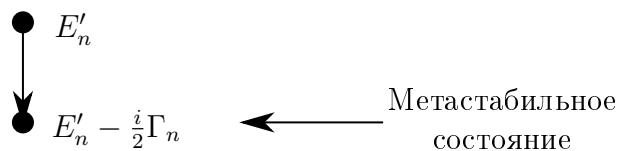


Рис. 15.4. Сдвиг полюса функции Грина вниз по мнимой оси в случае распадающе-гося $|\psi_n\rangle$

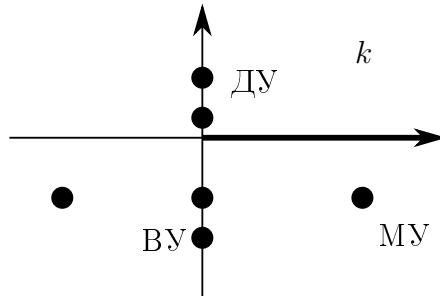


Рис. 15.5. Полюса амплитуды рассеяния для дискретных (ДУ), виртуальный (ВУ) и метастабильных (МУ) уровней

Из-за сдвига полюса (15.10) получим, что если:

$$\langle \psi_n | G(E) | \psi_n \rangle = \frac{1}{E - E'_n + \frac{i}{2}\Gamma_n}, \quad (15.11)$$

то

$$c_n(t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dE e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \cdot \frac{1}{E - E'_n + \frac{i}{2}\Gamma_n} = e^{-\frac{i}{\hbar}E'_n t - \frac{1}{2\hbar}\Gamma_n t} = e^{-\frac{i}{\hbar}E'_n t - \frac{1}{2\tau_n}t} \quad (15.12)$$

Тогда вероятность:

$$|c_n(t)|^2 \equiv P_n(t) = e^{-t/\tau_n} \quad (15.13)$$

Экспоненциальный закон распада означает, что данный уровень не дискретный, а является линейной комбинацией состояний непрерывного спектра:

$$|\psi_n\rangle = \int dE f(E) |\psi_E\rangle \quad (15.14)$$

Найдём, как эволюционирует это состояние:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi_n\rangle = \int dE f(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi_E\rangle \quad (15.15)$$

Тогда, учитывая, что:

$$\langle \psi_{E'} | \psi_E \rangle = \delta(E' - E) \quad (15.16)$$

получим

$$\begin{aligned} c_n = \langle \psi_n | \psi(t) \rangle &= \underbrace{\int dE' f^*(E') \langle \psi_{E'} |}_{\langle \psi_n |} \cdot \int dE f(E) e^{-\frac{i}{\hbar} Et} |\psi_E\rangle = \\ &= \int dE |f(E)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E'_n t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar} t}, \quad (15.17) \end{aligned}$$

при $t > 0$.

Вспомним, что $|\psi(x)|^2$ - это плотность вероятности обнаружить частицу в x , при том, что $\langle x | \psi \rangle \equiv \psi(x)$. По аналогии замечаем, что $\langle \psi_E | \psi_n \rangle \equiv f(E)$, таким образом, находим, что $|f(E)|^2$ - это плотность вероятности обнаружить систему с энергией E .

В оптике $|f(E)|^2$ называют формой линии. Найдём форму линии. При $t > 0$:

$$c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E'_n t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar} t} \quad (15.18)$$

Поскольку

$$\int dE |f(E)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = c_n(t), \quad (15.19)$$

то имеем:

$$c_n(-t) \equiv c_n^*(t) \Rightarrow c_n(-t) = e^{\frac{i}{\hbar} E'_n t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar} t}, \quad (t > 0), \quad (15.20)$$

тогда

$$c_n(t') = e^{-\frac{i}{\hbar} E'_n t' + \frac{\Gamma_n}{2\hbar} t'} \quad (t' < 0) \quad (15.21)$$

Сравнивая (15.18) и (15.21), увидим, что:

$$c_n(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E'_n t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar} |t|} \quad (15.22)$$

Из (15.17) заметим, что форму линии можно найти обратным преобразованием Фурье от (15.22):

$$\begin{aligned} |f(E)|^2 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \cdot e^{\frac{i}{\hbar} Et} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E'_n t - \frac{\Gamma_n}{2\hbar} |t|} = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\frac{\Gamma_n}{2\hbar} - \frac{i}{\hbar}(E - E'_n)} + \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \frac{1}{\frac{\Gamma_n}{2\hbar} + \frac{i}{\hbar}(E - E'_n)} = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma_n}{2}}{(E - E'_n)^2 + (\frac{\Gamma_n}{2})^2} = |f(E)|^2 \quad (15.23) \end{aligned}$$

Получили нормированную Лоренцеву кривую:

$$\int |f(E)|^2 dE = 1 \quad (15.24)$$

Из этого следует, что если Γ_n мало, то τ_n - велико, следовательно линия получается бледной и узкой с большим временем жизни (малое количество фотонов вылетает

в единицу времени). А может быть и наоборот: $\Gamma_n \uparrow; \tau_n \downarrow$, и линия получается яркая и широкая.

Если бы все переходы происходили в первом порядке теории возмущений, то так было бы всегда, и

$$\Gamma_n \tau_n \sim \hbar \quad (15.25)$$

Однако на практике встречаются бледные и широкие линии, где мы вынуждены использовать вместо \hat{H}_I :

$$\hat{H}_I \rightarrow \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I \quad (15.26)$$

Если элемент (15.26) из состояния ψ_n в ψ_n отличен от нуля, то происходит переход, который называется последовательным переходом.

Таким образом, имеем:

$$\Gamma_n \tau_n \geq \hbar, \quad (15.27)$$

что часто записывают в виде:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (15.28)$$

Соотношение (15.29) называют соотношением неопределённостей Бора. Следует понимать, что в отличии от соотношения неопределённостей Гейзенберга (15.28) не является теоремой, поскольку Δt - не оператор.

Докажем следующее соотношение:

$$\langle \psi_n | G | \psi_n \rangle = \frac{1}{E - E'_n + \frac{i}{2} \Gamma_n} \quad (15.29)$$

Для наглядности будем считать \hat{H}_I «маленьким», тогда (нулевой порядок):

$$\left\langle \psi_m \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \psi_n \right\rangle = \frac{\delta_{nm}}{E - E_n + i\epsilon} \quad (15.30)$$

Пусть теперь $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$, тогда введём обозначения:

$$\left\langle \psi_n \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 - \hat{H}_I + i\epsilon} \right| \psi_n \right\rangle \equiv G_{nn} \sim O(1) \quad (15.31)$$

$$\left\langle \psi_m \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 - \hat{H}_I + i\epsilon} \right| \psi_n \right\rangle \equiv G_{mn} \sim O(\hat{H}_I) \quad (15.32)$$

Матричные элементы будем брать из операторного уравнения на функцию Грина:

$$\begin{aligned} (E - \hat{H}_0 - \hat{H}_I + i\epsilon) G(E) &= 1, \\ (E - \hat{H}_0 + i\epsilon) G(E) &= 1 + \hat{H}_I \cdot G(E) \end{aligned} \quad (15.33)$$

Попробуем воспроизвести Борновский ряд, поделив (15.33) на $(E - \hat{H}_0 + i\epsilon)$, получим:

$$G(E) = \underbrace{G_0}_{0-\text{й пор.}} + \underbrace{G_0 \hat{H}_I G_0}_{1-\text{й пор.}} + \underbrace{G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I G_0}_{2-\text{й пор.}} + \dots, \quad (15.34)$$

но нам нужно загнать поправки в знаменатель функции Грина, а они в числителях, поэтому нужно искать матричные элементы напрямую из уравнения (15.33):

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_n \left| \left(E - \underbrace{\hat{H}_0}_{=E_n} + i\epsilon \right) G \right| \psi_n \right\rangle &= \langle \psi_n | 1 | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \hat{H}_I G | \psi_n \rangle \Rightarrow \\ &\Rightarrow (E_0 - E_n + i\epsilon) G_{nn} = 1 + \langle \psi_n | \hat{H}_I G | \psi_n \rangle \quad (15.35) \end{aligned}$$

Если в левой обкладке $\langle \psi_m |$:

$$(E - E_m + i\epsilon) G_{mn} = 0 + \langle \psi_m | \hat{H}_I G | \psi_n \rangle \quad (15.36)$$

Из (15.35), (15.36) видно, что выполняются оценки (15.31), (15.32). Преобразуем (15.35):

$$\begin{aligned} (E - E_n + i\epsilon) G_{nn} &= 1 + \underbrace{\langle \psi_n | \hat{H}_I | \psi_n \rangle}_{=E_n^{(1)}} G_{nn} + \sum_{m \neq n} \langle \psi_n | \hat{H}_I | \psi_m \rangle G_{mn} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \left(E - \underbrace{(E_n + E_n^{(1)})}_{E'_n} + i\epsilon \right) G_{nn} = 1 + \sum_{m \neq n} \underbrace{\langle \psi_n | \hat{H}_I | \psi_m \rangle}_{\text{1-й пор.}} \underbrace{G_{mn}}_{\text{до 1-го пор.}} \quad (15.37) \end{aligned}$$

Аналогично, используя $|\psi_n\rangle \langle \psi_n|$ и $|\psi_k\rangle \langle \psi_k|$ между \hat{H}_I и G в (15.36) преобразуем (15.36), учитывая, что нас интересуют члены до 1-го порядка малости:

$$(E - E_m + i\epsilon) G_{mn} = 0 + \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \cdot G_{nn} + \sum_{k \neq n} \underbrace{\langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_k \rangle}_{\text{1-й пор.}} \underbrace{G_{kn}}_{\text{1-й пор.}} \quad (15.38)$$

Таким образом, получим:

$$G_{mn} = \frac{1}{E - E_m + i\epsilon} \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \cdot G_{nn} \quad (15.39)$$

Подставим (15.39) в (15.37):

$$(E - (E_n + E_n^{(1)}) + i\epsilon) G_{nn} = 1 + \sum_{m \neq n} \frac{\left| \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \right|^2}{E - E_m + i\epsilon} \cdot G_{nn} \quad (15.40)$$

Вспомним, что:

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = \text{V.p. } \frac{1}{x} - \pi i \delta(x), \quad (15.41)$$

где $\pi i \delta(x)$ - интеграл по половине дуги окружности (См. рис. 15.6).

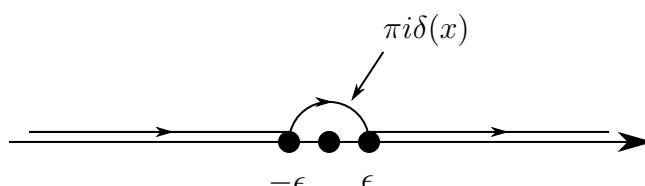


Рис. 15.6. Контур интегрирования по комплексной плоскости

Тогда (15.40) примет вид:

$$(E - (E_n + E_n^{(1)}) + i\epsilon)G_{nn} = 1 + \sum_{m \neq n} V.p. \frac{|\langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle|^2}{E - E_m} - \\ - \frac{i}{2} \cdot 2\pi \sum_{m \neq n} |\langle \psi_m | H_I | \psi_n \rangle|^2 \delta(E - E_n) \quad (15.42)$$

Лекция 16

Теория переходов

Функция Грина и эволюция системы

Имеем

$$\langle \psi_n | G(E) | \psi_n \rangle \equiv G_{nn}(E) \quad (16.1)$$

и

$$(E - (E_n + E_n^{(1)}) + i\epsilon) G_{nn}(E) = 1 + \sum_{m \neq n} V.p. \frac{1}{E - E_m} \cdot \left| \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \right|^2 G_{nn} - \\ - \frac{i}{\pi} 2\pi \sum_{m \neq n} \left| \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \right|^2 \delta(E - E_m) \cdot G_{nn} \quad (16.2)$$

обозначим:

$$E_n^{(2)}(E) \equiv \sum_{m \neq n} V.p. \frac{1}{E - E_m} \cdot \left| \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \right|^2 \quad (16.3)$$

$$\Gamma_n(E) \equiv 2\pi \sum_{m \neq n} \left| \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \right|^2 \delta(E - E_m) \quad (16.4)$$

Тогда

$$(E - (E_n + E_n^{(1)}) + i\epsilon) G_{nn}(E) = 1 + E_n^{(2)}(E) \cdot G_{nn} - \frac{i}{2} \Gamma_n(E) \cdot G_{nn}, \quad (16.5)$$

где заметим, что

$$E_n^{(2)}(E_n) \equiv E_n^{(2)} \text{ по стационарной теории возмущений} \quad (16.6)$$

$$\Gamma_n(E_n) \equiv \underbrace{\hbar \cdot \frac{1}{\tau_n}}_{\Gamma_n} \text{ по нестационарной теории возмущений} \quad (16.7)$$

Из (16.5) имеем

$$G_{nn}(E) = \frac{1}{E - E_n - E_n^{(1)} - E_n^{(2)}(E) + \frac{i}{2} \Gamma_n(E)} \quad (16.8)$$

По порядкам малости:

$$\begin{aligned} 0 : & E = E_n \\ 1 : & E = E_n + E_n^{(1)} \end{aligned}$$

А для 2-го порядка малости:

$$\begin{aligned} 2 : & E = E_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} (E_n + \cancel{E_n^{(1)}} + \dots) - \frac{i}{2} \Gamma_n (E_n + \cancel{E_n^{(1)}} + \dots) = \\ & = \underbrace{E_n + E_n^{(1)} + E_n^{(2)}}_{E'_n} - \frac{i}{2} \Gamma_n \end{aligned} \quad (16.9)$$

Таким образом, поскольку мы не требовали ограничения на малость гамильтониана \hat{H}_I , то экспоненциальный вид закона распада с помощью функции Грина можно подтвердить на большем промежутке времени от начала распада, чем с помощью нестационарной теории возмущений (См. рис. 16.1). Далее распад начинает приобретать полиномиальный характер.

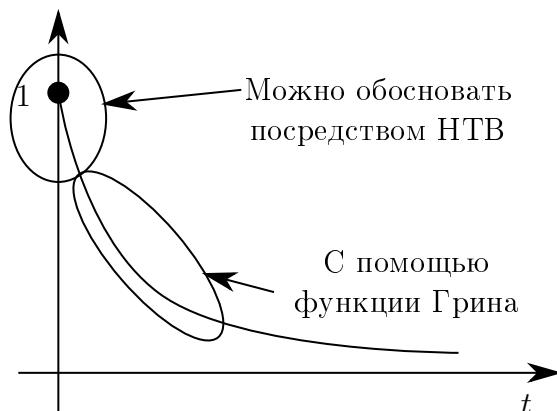


Рис. 16.1. Область обоснования закона распада с помощью НТВ и функции Грина

s-матрица

Пусть имеем (консервативную) систему с гамильтонианом $\hat{H}_0 + \hat{H}_I$, где \hat{H}_0 - известный гамильтониан, который мы умеем решать, а \hat{H}_I вызывает переходы. Стоит задача рассеяния. Рассмотрим упругое потенциальное рассеяние, которое выглядит следующим образом (См. рис. 16.2): большой волновой пакет (практически плоская волна) с начальным состоянием $|\psi_{\text{in}}\rangle$ налетает на малый потенциал после прохождения которого представляет собой тоже большой волновой пакет и расходящуюся сферическую волну ($|\psi_{\text{out}}\rangle$).

До и после потенциала гамильтониан системы: \hat{H}_0 ; а в потенциале: $\hat{H}_0 + \hat{H}_I$, и система находится в состоянии $|\psi_+\rangle$. Нам нужно найти оператор \hat{S} , который переводит систему из $|\psi_{\text{in}}\rangle$ в $|\psi_{\text{out}}\rangle$. Для этого найдем оператор $\hat{\Omega}$, который переводит систему из состояния $|\psi_+\rangle$ в состояние $|\psi_{\text{in}}\rangle$. Поскольку система «не чувствует» гамильтониан \hat{H}_I в $|\psi_{\text{in}}\rangle$ и $|\psi_{\text{out}}\rangle$, которые находятся на бесконечности, то при такой постановке задачи мы можем адиабатически включать \hat{H}_I , то есть представим:

$$\hat{H}_I \rightarrow \hat{H}_I \cdot e^{-\epsilon|t|} \quad (16.10)$$

Начнём с $|\psi_+\rangle$, в представлении Дирака если $|\psi(0)\rangle = |\psi_+\rangle$, то

$$|\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle = e^{+\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi_+\rangle \quad (16.11)$$

подчёркнутая часть имеет гладкий предел на ∞ , то есть:

$$|\psi_{\text{Д.}}(t)\rangle|_{t \rightarrow -\infty} = \hat{\Omega} |\psi_+\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle \quad (16.12)$$

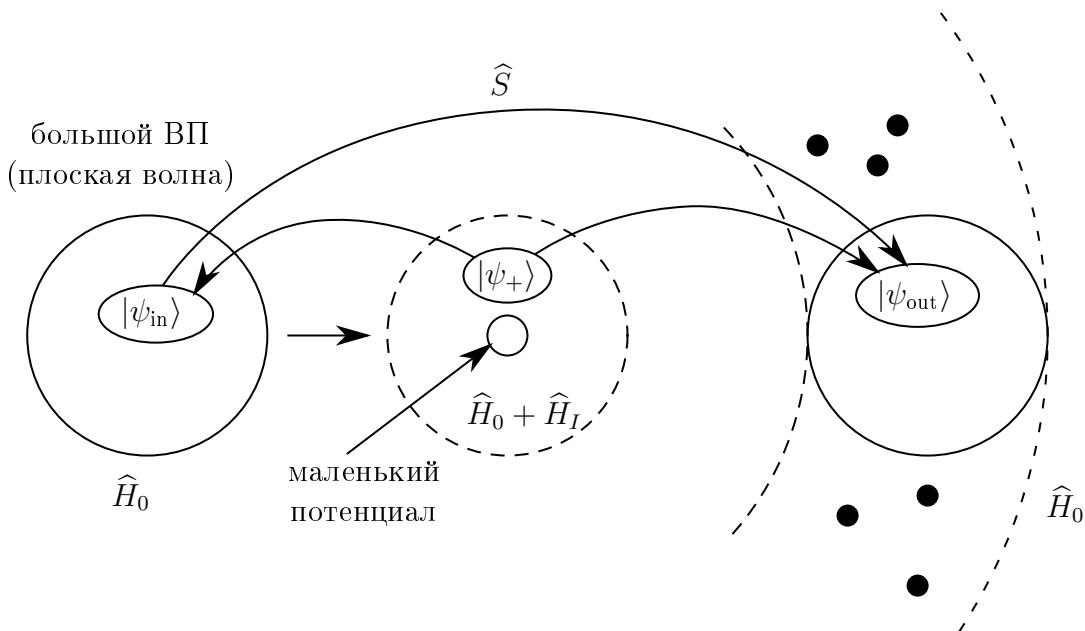


Рис. 16.2. Иллюстрация упругого потенциального рассеяния

В непрерывном спектре предел есть, а дискретный спектр останется на дискретном уровне, на него повесится $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$, которая не будет иметь отношения к эволюции системы, то есть оператор $\hat{\Omega}$ не является унитарным, поскольку не определён на дискретном спектре.

Теперь вместо $|\psi_+\rangle$ подставим решение стационарного уравнения Шрёдингера в непрерывном спектре:

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}_I) |\psi_+\rangle = E |\psi_+\rangle \quad (16.13)$$

и будем искать $|\psi_{in}\rangle$ и $|\psi_{out}\rangle$ для этого решения. Найдём $\hat{\Omega}$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{\text{д.}}(t)\rangle &= \hat{H}_{I,\text{д.}}(t) |\psi_{\text{д.}}(t)\rangle \Rightarrow |\psi_{\text{д.}}(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{H}_I \cdot e^{-\epsilon|t|}. \\ &\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \cdot \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} |\psi(0)\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi_+\rangle} = |\psi(0)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \cdot \hat{H}_I \cdot e^{-\epsilon|t|} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi(0)\rangle = \\ &= |\psi_+\rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t - \frac{i}{\hbar}Et + ct} \cdot \hat{H}_I \cdot |\psi_+\rangle \Rightarrow \\ \Rightarrow |\psi_{\text{д.}}(t \rightarrow -\infty)\rangle &= |\psi_+\rangle + 0 - \frac{1}{i\hbar} \cdot \frac{1}{\epsilon + \frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 - \frac{i}{\hbar}E} \cdot \hat{H}_I |\psi_+\rangle = \\ &= |\psi_+\rangle - \underbrace{\frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{H}_I}_{G_0(E)} |\psi_+\rangle = |\psi_{in}\rangle = \hat{\Omega} |\psi_+\rangle \quad (16.14) \end{aligned}$$

Откуда получаем уравнение Липпмана-Швингера:

$$|\psi_+\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle + G_0 \hat{H}_I |\psi_+\rangle \quad (16.15)$$

В более привычном виде:

$$\psi(x) = \underbrace{\psi_0(x)}_{=e^{ikx}} + \int d\bar{y} \left[G_0(\bar{x}, \bar{y}) \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \right] V(\bar{y}) \psi(\bar{y}) \quad (16.16)$$

Аналогично (16.14) для $|\psi_{\text{out}}\rangle$ найдём:

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = |\psi_+\rangle - \underbrace{\frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\epsilon}}_{G_0^+(E)} \hat{H}_I |\psi_+\rangle \quad (16.17)$$

Найдём уравнения для $|\psi_{\text{in}}\rangle$ и $|\psi_{\text{out}}\rangle$ и исключим из них $|\psi_+\rangle$. Домножим (16.14), (16.17) на $(E - \hat{H}_0)$, тогда:

$$(E - \hat{H}_0) |\psi_{\text{out}}\rangle = (E - \hat{H}_0) |\psi_+\rangle - \hat{H}_I |\psi_+\rangle = (E - \hat{H}_0 - \hat{H}_I) |\psi_+\rangle = 0 \quad (16.18)$$

то есть энергия E_{out} состояния $|\psi_{\text{out}}\rangle$ с невозмущённым гамильтонианом равна энергии E состояния $|\psi_+\rangle$ с возмущённым гамильтонианом, и наоборот. Тогда:

$$E = E_{\text{out}} = E_{\text{in}} \quad (16.19)$$

Имеем:

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = |\psi_+\rangle - G_0^+ \hat{H}_I |\psi_+\rangle \quad (16.20)$$

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = |\psi_+\rangle - G_0 \hat{H}_I |\psi_+\rangle \quad (16.21)$$

Вычтем (16.21) из (16.20):

$$|\psi_{\text{out}}\rangle - |\psi_{\text{in}}\rangle = (G_0 - G_0^+) \hat{H}_I |\psi_+\rangle \quad (16.22)$$

Напишем для $|\psi_+\rangle$ борновский ряд:

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= |\psi_{\text{in}}\rangle + G_0 \hat{H}_I |\psi_+\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle + G_0 \hat{H}_I |\psi_{\text{in}}\rangle + G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I |\psi_{\text{in}}\rangle + \\ &\quad + G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I |\psi_{\text{in}}\rangle + \dots \end{aligned} \quad (16.23)$$

Можно вынести справа $\hat{H}_I |\psi_{\text{in}}\rangle$, тогда слева будет борновский ряд для G_0 :

$$G_0 + G_0 \hat{H}_I G_0 + G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I G_0 + \dots = G, \quad (16.24)$$

но это нам ничего не даст. Лучше в (16.23) вынести $|\psi_{\text{in}}\rangle$ справа за скобку и G_0 слева за скобку, тогда в скобках останется:

$$\hat{H}_I + \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I + \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I + \dots = T \quad (16.25)$$

Заметим, сравнивая (16.23) и (16.25), что

$$\hat{H}_I |\psi_+\rangle \equiv T |\psi_{\text{in}}\rangle \quad (16.26)$$

Подставив (16.26) в (16.22), получим

$$|\psi_{\text{out}}\rangle - |\psi_{\text{in}}\rangle = (G_0 - G_0^+) T |\psi_{\text{in}}\rangle \quad (16.27)$$

Вспомним, что

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \text{V.p.} \frac{1}{x} \mp \pi i \delta(x) \quad (16.28)$$

Тогда при $t \rightarrow \pm\infty$

$$G_0 - G_0^+ = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} - \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\epsilon} = -2\pi i \delta(E - \hat{H}_0) \quad (16.29)$$

Таким образом, имеем

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \hat{S} |\psi_{\text{in}}\rangle = |\psi_{\text{in}}\rangle - 2\pi i \delta(E_{\text{in}} - \hat{H}_0) T |\psi_{\text{in}}\rangle \quad (16.30)$$

Найдём матричные элементы S -матрицы. Возьмём в качестве $|\psi_{\text{in}}\rangle$ базисный вектор $|\psi_a\rangle$ гамильтониана \hat{H}_0 и домножим (16.30) слева на другой его базисный вектор $\langle\psi_b|$, тогда

$$S_{ba} = \underbrace{\langle\psi_b|\psi_a\rangle}_{\delta_{ab}} - 2\pi i \left\langle \underbrace{\psi_b}_{\delta_{ab}} \left| \delta \left(E_a - \underbrace{\hat{H}_0}_{E_b} \right) T \right| \psi_a \right\rangle \Rightarrow S_{ba} = \delta_{ba} - 2\pi i T_{ba} \delta(E_b - E_a) \quad (16.31)$$

Сделаем некоторые выводы:

1) Оператор T :

$$T = \hat{H}_I + \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I + \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I + \dots \quad (16.32)$$

является эрмитовым только в первом порядке теории возмущений, поскольку во втором порядке в него входит G_0 , которая в общем случае не эрмитова.

2) Оператор $\hat{\Omega}$ не унитарный, поскольку не определён для дискретного спектра, а в $|\psi_+\rangle$ спектр дискретный, но $\hat{\Omega}$ сохраняет норму, так как является пределом унитарного оператора. Но оператор \hat{S} определён для любого вектора в $|\psi_{\text{in}}\rangle$ (непрерывный спектр) (См. рис. 16.3), и большинстве задач S -матрица является унитарной.

Получим золотое правило Ферми вне рамок теории возмущений. Пусть $b \neq a$, тогда вероятность перехода:

$$P_{a \rightarrow b} \equiv |S_{ba}|^2 = 4\pi^2 |T_{ba}|^2 \cdot \underbrace{\delta(E_b - E_a)}_{\delta(0)}, \quad (16.33)$$

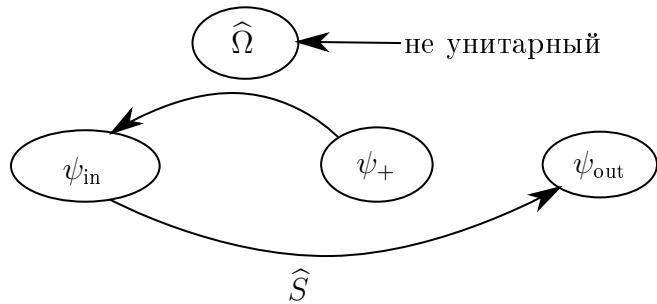


Рис. 16.3. Схема действий операторов $\hat{\Omega}$ и \hat{S}

где вторая дельта - это дельта от нуля с учётом первой дельты. Найдём « $\delta(0)$ ». Для $\delta(E)$ имеем:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = 2\pi\hbar\delta(E) \quad (16.34)$$

Пусть $E = 0$, тогда (16.34) примет вид:

$$\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt}_{=T} \cdot 1 = 2\pi\hbar\delta(0), \quad (16.35)$$

где T - это время наблюдения. Подставив « $\delta(0)$ » из (16.35) в (16.33), получим:

$$P_{a \rightarrow b} \equiv |S_{ba}|^2 = 4\pi^2 |T_{ba}|^2 \cdot \delta(E_b - E_a) \cdot \frac{T}{2\pi\hbar} \quad (16.36)$$

Разделим (16.36) на T , тогда получим вероятность в единицу времени. То есть:

$$v_{a \rightarrow b} = \frac{P_{a \rightarrow b}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a) \quad (16.37)$$

Тогда скорость распада a -го состояния:

$$v_a \equiv \frac{1}{\tau_a} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{b \neq a} |\langle \psi_b | T | \psi_a \rangle|^2 \cdot \delta(E_b - E_a) \quad (16.38)$$

Теперь из (16.38) явно видно, что если $\langle \psi_b | \hat{H}_I | \psi_a \rangle = 0$, то переход всё равно может быть, если, например, $\langle \psi_b | \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I | \psi_a \rangle \neq 0$.

Оптическая теорема в теории переходов

Из закона сохранения вероятности:

$$\hat{S}^+ \hat{S} = 1, \quad (16.39)$$

то есть

$$\sum_b |S_{ba}|^2 = 1 \quad (16.40)$$

(для падения на центр это неверно). Подставим (16.31) в (16.40), выделив отдельное слагаемое с $b = a$:

$$\begin{aligned} & |1 - 2\pi iT_{aa}\delta(E_a - E_a)|^2 + \sum_{b \neq a} |2\pi iT_{ba}\delta(E_b - E_a)|^2 = 1 = \\ & = 1 - 2\pi iT_{aa}\delta(0) + 2\pi iT_{aa}^*\delta(0) + 2\pi \sum_{b \neq a} |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a)\delta(0) + \\ & + 2\pi \sum_{b \neq a} |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a)\delta(0) = 1 \Rightarrow \\ & \Rightarrow 2\pi \sum_b |T_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a) = iT_{aa} - iT_{aa}^* \equiv -2i \operatorname{Im} \{T_{aa}\} = \\ & = \Gamma_a = -2i \operatorname{Im} \{T_{aa}\} \quad (16.41) \end{aligned}$$

Лекция 17

Теория переходов

Оптическая теорема в теории переходов

Получили:

$$-2 \operatorname{Im} \{T_{aa}\} = \Gamma_a \quad (17.1)$$

В первом борновском приближении для амплитуды рассеяния имеем:

$$f^{(1)} = \dots \int e^{i\bar{q} \cdot \bar{x}} V(\bar{x}) d\bar{x}, \quad (17.2)$$

где $\bar{q} = \bar{k} - \bar{k}'$; \bar{k} - волновой вектор налетающей волны, \bar{k}' - волновой вектор рассеянной волны. Полное сечение рассеяния:

$$\sigma_{\text{tot.}} = \int d\Omega |f^{(1)}|^2 \quad (17.3)$$

С другой стороны матричный элемент для гаммы был:

$$\sum_b \left| \langle \psi_b | \hat{H}_I | \psi_a \rangle \right|^2 \cdot \delta(\dots), \quad (17.4)$$

где ψ_a - это in-состояние $|\psi_a\rangle = e^{i\bar{k} \cdot \bar{x}}$, \hat{H}_I - это потенциал $V(\bar{x})$, а ψ_b - рассеянная волна $\langle \psi_b | = e^{-i\bar{k}' \cdot \bar{x}}$. Таким образом, левая часть (17.1) содержит интеграл:

$$\int e^{i\bar{q} \cdot \bar{x}} V(\bar{x}) d\bar{x} \quad (17.5)$$

В оптической теореме фигурирует амплитуда рассеяния вперёд, то есть $\theta = 0; \bar{k}' = \bar{k}$. Учитывая (17.4), (17.5), понимаем, что условие $\bar{k}' = \bar{k}$ - это условие диагонального элемента T . То есть, в левой части (17.1) стоит мнимая часть амплитуды рассеяния вперёд.

Теперь вспомним, что гамма - это произведение постоянной Планка на обратное время жизни, то есть на число частиц, рассеянных в единицу времени:

$$\Gamma_a = \frac{\hbar}{\tau_a}, \quad (17.6)$$

где τ_a - время жизни уровня.

Чтобы получить сечение рассеяния нужно отнормировать на единицу поток налетающих частиц. Таким образом, видим, что (17.1) как раз означает, что сечение рассеяния выражается через мнимую часть амплитуды рассеяния вперёд.

Вспомним, что

$$T = \hat{H}_I + \hat{H}_I G_0 \hat{H}_I + \dots, \quad (17.7)$$

где G_0 берётся при энергии, одинаковой как при $-\infty$, так и при нуле по времени (когда волновой пакет находится на потенциале), так и после рассеяния на $+\infty$, то

есть система ведёт себя, как консервативная. Что такое диагональный матричный элемент T_{aa} в первом порядке:

$$T_{aa} = \langle \psi_a | \hat{H}_I | \psi_a \rangle, \quad (17.8)$$

но (17.8) не является поправкой к энергии, поскольку ψ_a - имеет непрерывный спектр, а при внесении в систему с непрерывным спектром гамильтониана возмущения, у неё не сдвигается энергия, а при той же энергии происходит упругое потенциальное рассеяние. Однако если превратить непрерывный спектр ψ_a в дискретный известными нам методами, то (17.8) станет поправкой к энергии. Вспомним, что при переходах что-то похожее на энергию (а именно полюс функции Грина) сдвигается следующим образом:

$$E_n \rightarrow E'_n - \frac{i}{2}\Gamma_n \quad (17.9)$$

Можно увидеть, что если считать T_{aa} поправкой к энергии (что не так), то согласно (17.1) эта поправка имеет (как и в (17.9)) мнимую часть, равную $-\frac{i}{2}\Gamma_a$.

Вторичное квантование

Вторичное квантование - это способ описания рождения и уничтожения частиц, а также систем, у которых число частиц неизвестно.

Предыдущие методы не помогают описывать такие системы, поскольку не имеют операторов, переводящих одиночественное состояние в двухчастичное:

$$\psi(x) \rightarrow \psi(x, y) \quad (17.10)$$

и наоборот.

Есть три эквивалентных способа построения вторичного квантования:

- 1) Представление через числа заполнения
- 2) Введение операторов числа частиц
- 3) Аксиоматический

Аксиоматический способ построения

Пусть есть одиночественная квантовая механика и в ней есть какой-то базис $\psi_n(x)$. Определим для каждого вектора этого базиса операторы \hat{a}_n, \hat{a}_n^+ , которые являются эрмитово сопряжёнными:

$$\begin{aligned} \hat{a}_n &= (\hat{a}_n^+)^+ \\ \hat{a}_n^+ &= (\hat{a}_n)^+ \end{aligned}$$

Для них постулируем следующие канонические коммутационные соотношения.
Для бозонов:

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m^+]_- = \delta_{nm} \quad (17.11)$$

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m]_- = 0 \quad (17.12)$$

$$[\hat{a}_n^+, \hat{a}_m^+]_- = 0 \quad (17.13)$$

Это эквивалентно с алгебраической точки зрения бесконечномерному гармоническому осциллятору, для которого \hat{a}_n^+, \hat{a}_n - операторы рождения и уничтожения движения по соответствующей оси.

Для фермионов:

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m^+]_+ = \delta_{nm} \quad (17.14)$$

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_m]_+ = 0 \quad (17.15)$$

$$[\hat{a}_n^+, \hat{a}_m^+]_+ = 0 \quad (17.16)$$

Минус у квадратных скобок обозначает коммутатор:

$$[\hat{A}, \hat{B}]_- = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad (17.17)$$

а плюс - антисимметрический:

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} \quad (17.18)$$

Вакуум определяется, как состояние $|0\rangle$, для которого при любом n выполняется:

$$\hat{a}_n |0\rangle = 0; \quad (17.19)$$

условие нормировки:

$$\langle 0|0 \rangle = 1 \quad (17.20)$$

Вакуум означает отсутствие частиц.

Далее строятся возбуждённые состояния:

$$\hat{a}_n^+ |0\rangle = |n\rangle, \quad (17.21)$$

где $|n\rangle$ - это одна частица в состоянии $|\psi_n\rangle$.

Таким образом, \hat{a}_n^+ - оператор, который рождает частицы (оператор рождения), \hat{a}_n - оператор уничтожения.

Найдём действие оператора \hat{a}_m на состояние $|n\rangle$, учитывая (17.11), (17.14) (17.17), (17.18), получим:

$$\hat{a}_m |n\rangle = \hat{a}_m \hat{a}_n^+ |0\rangle = (\delta_{nm} \pm \cancel{\hat{a}_n^+ \hat{a}_m}) |0\rangle = \delta_{nm} |0\rangle \quad (17.22)$$

То есть \hat{a}_m - оператор, который (при $m = n$) уничтожает частицу и переводит систему в состояние вакуума. Если $m \neq n$, то он тождественно равен нулю.

С помощью принципа суперпозиции можем построить состояние с неизвестным числом частиц, например:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |n\rangle \quad (17.23)$$

Определение

Одночастичным состоянием называется любое состояние, являющееся линейной комбинацией базисных векторов ($|n\rangle$) в подпространстве одночастичных состояний:

$$|\chi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n c_n \hat{a}_n^+ |0\rangle \quad (17.24)$$

Определим оператор волновой функции:

$$\hat{\psi}(x) \equiv \sum_n \psi_n(x) \hat{a}_n \quad (17.25)$$

с его помощью можно вернуться в обычную квантовую механику. Для этого построим конструкцию:

$$\begin{aligned} \chi(x) = \frac{1}{\sqrt{1!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) | \chi \rangle &= \left\langle 0 \left| \sum_m \psi_m(x) \hat{a}_m \sum_n c_n \hat{a}_n^+ \right| 0 \right\rangle = \\ &= \sum_{n,m} \psi_m(x) c_n \underbrace{\langle 0 | \hat{a}_m \hat{a}_n^+ | 0 \rangle}_{\delta_{nm}|0\rangle} \Rightarrow \chi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \end{aligned} \quad (17.26)$$

выражение (17.26) представляет собой обычную волновую функцию.

Различие бозонов и фермионов во вторичном квантовании

Рассмотрим двухчастичное состояние двух тождественных фермионов:

$$\hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ |0\rangle = |nm\rangle \quad (17.27)$$

Из (17.16), (17.18) следует, что

$$[\hat{a}_n^+, \hat{a}_m^+]_+ = \hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ + \hat{a}_m^+ \hat{a}_n^+ = 0 \quad (17.28)$$

Тогда если $m = n$, то

$$\hat{a}_n^+ \hat{a}_n^+ = 0; \quad (17.29)$$

а если $m \neq n$, то

$$\hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ = -\hat{a}_m^+ \hat{a}_n^+ \quad (17.30)$$

Выражение (17.29) представляет собой принцип Паули, а (17.30) обозначает полную антисимметричность волновых функций фермионов относительно перестановок частиц.

В случае бозонов две частицы могут находиться в одном и том же состоянии:

$$\frac{(\hat{a}_n^+)^2}{\sqrt{2!}} |0\rangle$$

или k частиц могут находиться в одном состоянии:

$$\frac{(\hat{a}_n^+)^k}{\sqrt{k!}} |0\rangle$$

Аналогично (17.26) можно вернуться к нормальной двухчастичной квантовой механике двух тождественных фермионов:

$$|nm\rangle = -|mn\rangle \quad (17.31)$$

Произвольное двухчастичное состояние двух фермионов имеет вид:

$$|\chi\rangle \equiv \sum_{n < m} c_{nm} |nm\rangle \quad (17.32)$$

Тогда нормальная двухчастичная волновая функция для (17.32) имеет вид:

$$\chi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \langle 0 | \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(y) | \chi \rangle \quad (17.33)$$

Для экономии времени проведём выкладку не для произвольного состояния (17.32), а для базисного вектора (17.31):

$$\chi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \left\langle 0 \left| \sum_k \psi_k(x) \hat{a}_k \cdot \sum_l \psi_l(y) \hat{a}_l \hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ \right| 0 \right\rangle \quad (17.34)$$

вынеся суммы и числовые коэффициенты и поменяв местами \hat{a}_l и \hat{a}_n^+ с помощью (17.14), (17.18) получим следующее выражение:

$$\langle 0 | \hat{a}_k (\delta_{ln} - \hat{a}_n^+ \hat{a}_l) \hat{a}_m^+ | 0 \rangle \quad (17.35)$$

Из (17.22) помним, что:

$$\hat{a}_m \hat{a}_n^+ |0\rangle = \delta_{nm} |0\rangle, \quad (17.36)$$

комплексно сопрягая (17.36), видим, что:

$$\langle 0 | \hat{a}_n \hat{a}_m^+ = \delta_{nm} \langle 0 | \quad (17.37)$$

Таким образом, благодаря (17.36), (17.37) выражение (17.35) принимает вид

$$\delta_{ln} \cdot \delta_{km} - \underbrace{\langle 0 | \hat{a}_k \hat{a}_n^+}_{\delta_{kn}} \underbrace{\hat{a}_l \hat{a}_m^+ | 0 \rangle}_{\delta_{lm}}, \quad (17.38)$$

то есть (17.34) станет:

$$\chi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_m(x) \psi_n(y) - \psi_n(x) \psi_m(y)) \quad (17.39)$$

Выражение (17.39) представляет собой базисный вектор в пространстве состояний двух тождественных фермионов.

Замечание

- 1) Лазера из фермионов не бывает из-за принципа Паули. Пусть есть состояние, для которого усреднение оператора \hat{a}_n даёт какое-то число:

$$\langle ? | \hat{a}_n | ? \rangle = c$$

Тогда для двух таких состояний и соответствующих им усреднений должны выполняться коммутационные соотношения. Для бозонов никаких противоречий не возникает:

$$\underbrace{\hat{a}_n}_{c} \underbrace{\hat{a}_m}_{c'} - \underbrace{\hat{a}_m}_{c'} \underbrace{\hat{a}_n}_{c} = \underbrace{0}_{140}$$

, но в случае фермионов числа не могут им удовлетворить:

$$\underbrace{\hat{a}_n}_{c} \quad \underbrace{\hat{a}_m}_{c'} \quad + \quad \underbrace{\hat{a}_m}_{c'} \quad \underbrace{\hat{a}_n}_{c} \quad = \quad \underbrace{0}_{0}$$

, поскольку классический предел для фермионов - выражается в гравитационных числах.

- 2) У оператора волновой функции есть простой физический смысл. Возьмём эрмитово сопряжение для этого оператора:

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_n \psi_n^*(x) \cdot \hat{a}_n^+ \quad (17.40)$$

Теперь возьмём состояние, которое получается в результате действия $\hat{\psi}^+(x_0)$ на вакуум:

$$|\xi\rangle \equiv \hat{\psi}^+(x_0) |0\rangle = \sum_n \psi_n^*(x_0) \hat{a}_n^+ |0\rangle \quad (17.41)$$

Найдём обычную волновую функцию, соответствующую состоянию (17.41):

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\psi}(x) | \xi \rangle &= \left\langle 0 \left| \sum_m \psi_m(x) \hat{a}_m \sum_n \psi_n^*(x_0) \hat{a}_n^+ \right| 0 \right\rangle = \\ &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x_0) = \delta(x - x_0) \end{aligned} \quad (17.42)$$

Таким образом, мы явно видим, что оператор $\hat{\psi}^+(x_0)$ рождает частицу в точке x_0 .

Составим таблицу с базисами в подпространствах, соответствующих разному числу частиц системы:

Число частиц	вектор	(17.43)
0	$ 0\rangle$	
1	$\hat{a}_n^+ 0\rangle$	
2	$\hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ 0\rangle$	
3	$\hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_l^+ 0\rangle$	
...	...	

Таблица (17.43) - это базис в фоковском пространстве состояний, а произвольный вектор в нём - их линейная комбинация, то есть состояние с неопределенным числом частиц.

Составим произвольный вектор в фоковском пространстве в общем виде. Оператор \hat{a}_1^+ , действуя на вакуум, создаёт частицу в состоянии $|\psi_1\rangle$. Степень этого оператора будет равна числу частиц в таком состоянии у данного вектора (для

фермионов, очевидна, степень будет равна либо 0, либо 1). Тогда произвольное состояние (произвольный вектор) в фоковском пространстве с учётом нормировки можно записать, как:

$$\frac{(\hat{a}_1^+)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \cdot \frac{(\hat{a}_2^+)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \cdot \frac{(\hat{a}_3^+)^{n_3}}{\sqrt{n_3!}} \cdots |0\rangle, \quad (17.44)$$

где n_1, n_2, \dots для фермионов равны 0; 1, а для бозонов 0; 1; 2;

Значит базисный вектор - это столб:

$$\begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (17.45)$$

Выражение (17.45) называется представлением чисел заполнения. При построении вторичного квантования 1-м способом, стартуют с выражения (17.45).

Введение оператора числа частиц

При данном способе построения начинают с введения оператора:

$$\hat{N}_k \equiv \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \quad (17.46)$$

Для бозонов оператор (17.46) показывает номер уровня, то есть число частиц в k -м состоянии.

Для фермионов операторы \hat{a}_m, \hat{a}_m^+ - это сдвиговые операторы для наблюдаемой (17.46), убедимся в этом ($m \neq k$):

$$\begin{aligned} [\hat{a}_m, \hat{N}_k] &= \underline{\hat{a}_m} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k - \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \underline{\hat{a}_m} = -\hat{a}_k^+ \underline{\hat{a}_m} \hat{a}_k - \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \underline{\hat{a}_m} = \\ &= \cancel{(-1)} \cancel{(<1)} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_m - \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_m = 0 \end{aligned} \quad (17.47)$$

Для $m = k$:

$$[\hat{a}_k, \hat{N}_k] = \underline{\hat{a}_k} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k - \hat{a}_k^+ \cancel{\hat{a}_k} \cancel{\hat{a}_k} = \hat{a}_k - \hat{a}_k^+ \cancel{\hat{a}_k} \cancel{\hat{a}_k} = \hat{a}_k \quad (17.48)$$

В итоге получим:

$$[\hat{N}_k, \hat{a}_k] = -\hat{a}_k \quad (17.49)$$

$$[\hat{N}_k, \hat{a}_k^+] = \hat{a}_k^+ \quad (17.50)$$

Вспомним доказанную нами теорему: если для наблюдаемой \hat{A} коммутатор с некоторыми операторами \hat{S}, \hat{S}^+ таковы, что:

$$[\hat{A}, \hat{S}] = \Delta \cdot \hat{S} \quad (17.51)$$

$$[\hat{A}, \hat{S}^+] = -\Delta \cdot \hat{S}^+, \quad (17.52)$$

то оператор \hat{S} сдвигает собственные значения наблюдаемой \hat{A} на Δ , а оператор \hat{S}^+ сдвигает собственные значения \hat{A} на $-\Delta$.

С учётом этой теоремы понятно, что \hat{a}_k уменьшает собственные значения \hat{N}_k на 1, а оператор \hat{a}_k^+ увеличивает их на 1.

Добавим к выше сказанному, что действие оператора \hat{N}_k на вакуум даёт тождественный нуль:

$$\hat{N}_k |0\rangle \equiv 0 \quad (17.53)$$

Таким образом, \hat{N}_k - это число частиц в k -м состоянии.

Определим оператор числа частиц в системе:

$$\hat{N} = \sum_k \hat{N}_k \quad (17.54)$$

Осталось определить наблюдаемые во вторичном квантовании.

Одночастичный оператор - это оператор, который относится к одной частице: $\frac{\hat{p}^2}{2m}; \hat{l}; \hat{V}(x); \hat{x}; \dots$

Во вторичном квантовании одночастичный оператор представляет собой следующую конструкцию:

$$\hat{V} = \int d\bar{x} \hat{\psi}^+(\bar{x}) \hat{V}(\bar{x}) \hat{\psi}(\bar{x}) \quad (17.55)$$

Убедимся в этом на примере одночастичного состояния.

Пусть есть состояние $|n\rangle$ и состояние $|m\rangle$. Найдём соответствующий матричный элемент для оператора (17.55):

$$\langle n | \hat{V} | m \rangle = \left\langle n \left| \int dx \sum_k \underline{\psi}_k^*(x) \hat{a}_k^+ \cdot \underline{V(x)} \sum_l \underline{\psi}_l(x) \hat{a}_l \right| m \right\rangle \quad (17.56)$$

Введём обозначение:

$$\int dx \underline{\psi}_k^* \cdot \underline{V(x)} \cdot \underline{\psi}_l(x) \equiv V_{kl} \quad (17.57)$$

С учётом (17.57) выражение (17.56) примет вид:

$$\langle n | \hat{V} | m \rangle = \left\langle n \left| \sum_{k,l} V_{kl} \underline{\hat{a}_k^+ \hat{a}_l} \right| m \right\rangle = \sum_{k,l} \langle 0 | \delta_{nk} V_{kl} \delta_{lm} | 0 \rangle = V_{nm} \quad (17.58)$$

Лекция 18

Вторичное квантование

Итак

$$\widehat{V} = \int dx \widehat{\psi}^+(x) V(x) \widehat{\psi}(x) = \sum_{m,n} V_{mn} \widehat{a}_m^+ \widehat{a}_n \quad (18.1)$$

Оператор \widehat{V} работает для любого числа частиц в системе. Рассмотрим единичный оператор вместо $V(x)$ в (18.1) (его матричные элементы: δ_{mn}):

$$1 \rightarrow \widehat{N} = \int dx \widehat{\psi}^+(x) \widehat{\psi}(x) = \sum_n \widehat{a}_n^+ \widehat{a}_n = \sum_n \widehat{N}_n, \quad (18.2)$$

то есть \widehat{N} - это оператор числа частиц.

Пусть ψ_n - базис одиночественного стационарного состояния, то есть собственная функция гамильтониана, тогда

$$\widehat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \Rightarrow H_{mn} = E_n\delta_{mn} \Rightarrow \widehat{H} = \sum_n E_n \widehat{a}_n^+ \widehat{a}_n = \sum_n E_n \cdot \widehat{N}_n \quad (18.3)$$

Получаем оператор плотности числа частиц:

$$\widehat{N}(x) = \widehat{\psi}^+(x) \widehat{\psi}(x) \quad (18.4)$$

То есть число частиц в объёме V :

$$N_V = \int_V dx \widehat{\psi}^+(x) \widehat{\psi}(x) \quad (18.5)$$

Двухчастичный оператор - это оператор, который относится к двум частицам. Например, потенциал взаимодействия $W(x, y)$:

$$\widehat{W} = \frac{1}{2} \int dx dy \widehat{\psi}^+(x) \widehat{\psi}^+(y) \cdot W(x, y) \cdot \widehat{\psi}(y) \widehat{\psi}(x) \sim \sum_{k,l,m,n} W_{klmn} \widehat{a}_k^+ \widehat{a}_l^+ \widehat{a}_m \widehat{a}_n \quad (18.6)$$

Оператор (18.6) работает в нулевом приближении (См. рис. 18.1).

Поскольку оператор (18.6) - двухчастичный, то очевидно:

$$\langle n | \widehat{W} | m \rangle = 0 \quad (18.7)$$

Так что кулоновское и обменное взаимодействие - это:

$$\langle mn | \widehat{W} | mn \rangle \quad (18.8)$$

Рассмотрим обычный гармонический осциллятор в основном состоянии $|0\rangle$, в котором есть малая нелинейность αx^4 (См. рис. 18.2). Поправку можно найти через теорию возмущений.

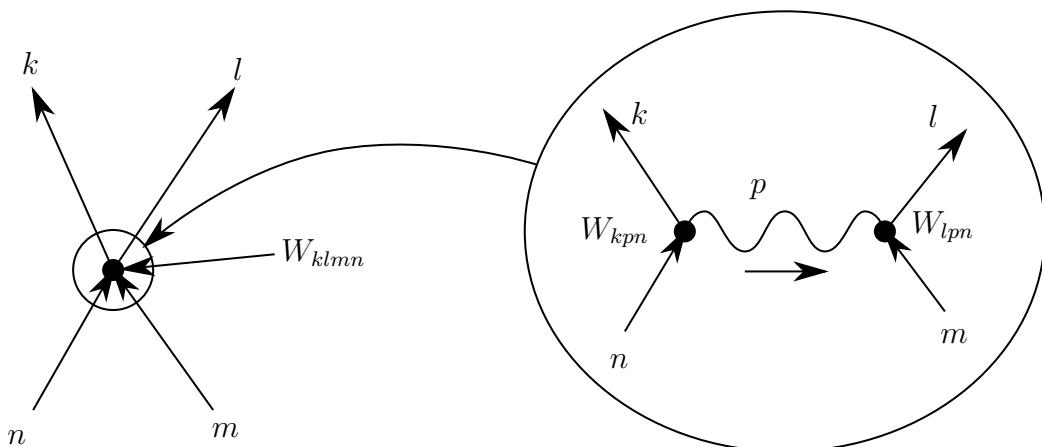


Рис. 18.1. Слева - нулевое приближение рассеяния; справа - первое приближение

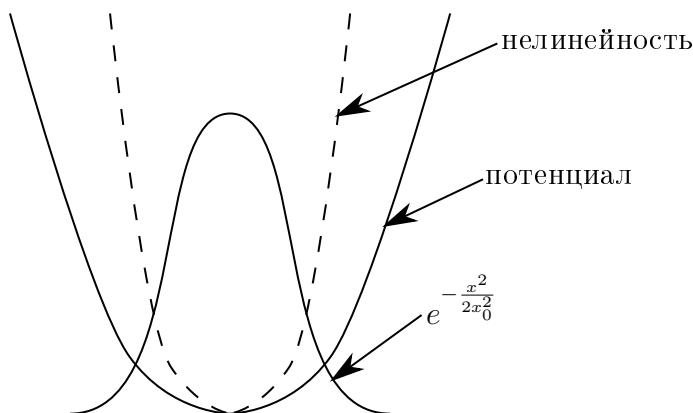


Рис. 18.2. Гармонический осциллятор с нелинейностью

Но лучше найти решение вариационным методом по ξ : $\left(e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}} \right)$.

Найдём, что означает изменение ширины Гауссовского пакета для \hat{a} и \hat{a}^+ (обычные операторы).

Основное состояние гармонического осциллятора с другой шириной - это их линейная комбинация:

$$\hat{\tilde{a}} \equiv u\hat{a} + v\hat{a}^+; \quad \hat{\tilde{a}}^+ = u^*\hat{a}^+ + v^*\hat{a} \quad (18.9)$$

Их коммутатор:

$$\left[\hat{\tilde{a}}, \hat{\tilde{a}}^+ \right] = 1 \quad (18.10)$$

Правильное нулевое приближение в этой задаче:

$$\hat{\tilde{a}} |0\rangle = 0 \quad (18.11)$$

Имеем:

$$x^4 = (\hat{a} + \hat{a}^+)^4 \quad (18.12)$$

Если гамильтониан:

$$\hat{H}_0 = \sum_n E_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n \quad (18.13)$$

и парное взаимодействие:

$$\sum W_{klmn} \hat{a}_k^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_m \hat{a}_n \quad (18.14)$$

Перекошенные операторы:

$$\hat{\tilde{a}}_n = \sum_m u_{nm} \hat{a}_m + v_{nm} \hat{a}_m^+ \quad (18.15)$$

Настоящий вакуум для данной системы:

$$\hat{\tilde{a}}_n |0\rangle = 0, \quad (18.16)$$

где $|0\rangle$ относительно старых операторов - это состояние с неопределенным числом частиц.

Квантование электромагнитного поля

По аналогии с гармоническим осциллятором. Задача. Построить квантовый объект, классическим пределом которого будет электромагнитное поле. Для гармонического осциллятора:

$$\hat{x}_{\Gamma}(t) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{\hat{a} e^{-i\omega t}}_{\hat{a}_{\Gamma}(t)} + \underbrace{\hat{a}^+ e^{i\omega t}}_{\hat{a}_{\Gamma}^+(t)} \right); \quad (18.17)$$

$$\hat{p}_{\Gamma}(t) = \frac{p_0}{\sqrt{2i}} (\hat{a} e^{-i\omega t} + \hat{a}^+ e^{i\omega t}) = m \hat{x}_{\Gamma}(t) \quad (18.18)$$

Гамильтониан:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\underbrace{\hat{a}_{\Gamma}^+(t) \hat{a}_{\Gamma}(t)}_{\hat{a}^+ \hat{a}} + \frac{1}{2} \right), \quad (18.19)$$

где

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= 1 \\ x_0^2 &= \frac{\hbar}{\sqrt{km}}; \\ p_0^2 &= \hbar\sqrt{km} \end{aligned}$$

С учётом этого получаем:

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \rightarrow \hbar\omega \quad (18.20)$$

Получим классический предел. Построим когерентное состояние:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} e^{\alpha\hat{a}^+} |0\rangle \quad (18.21)$$

Вспомним, что \hat{a}^+ собирается из x и p , а оператор трансляции в координатном представлении:

$$e^{\frac{i}{\hbar}px_0}; \quad (18.22)$$

оператор трансляции в импульсном представлении:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}x p_0} \quad (18.23)$$

Тогда становится ясно, что $e^{\alpha\hat{a}^+}$ отвечает за перемещение гауссового пика в координатном и в импульсном представлениях.

Вспомним, что состояние (18.21) не является состоянием с определённой энергией. Разложим в ряд:

$$|\alpha\rangle = \sum_n e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (18.24)$$

Вспомним, что:

$$\hat{a} |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \quad (18.25)$$

$$\langle \alpha | \hat{a}^+ = \langle \alpha | \alpha^* \quad (18.26)$$

Тогда получим:

$$\langle \alpha | \hat{x}_{\Gamma}(t) | \alpha \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) = \frac{x_0}{\sqrt{2}} |\alpha| \cdot 2 \cos(\omega t - \varphi) \quad (18.27)$$

Из (18.27), учитывая малости имеем:

$$x_0 \sim \sqrt{\hbar} \Rightarrow \alpha \sim \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \quad (18.28)$$

Для дисперсий операторов имеем:

$$D\hat{x} \sim \frac{x_0^2}{2}; \quad D\hat{p} \sim \frac{p_0^2}{2} \quad (18.29)$$

Теперь можно проделать всё то же самое, только в обратном направлении. Имеем классическую систему с данным (18.27) и энергией:

$$\hbar\omega \left(\frac{\alpha^*\alpha + \alpha\alpha^*}{2} \right), \quad (18.30)$$

тогда квантовая система, в которой:

$$\alpha \rightarrow \hat{a}; \quad \alpha^* \rightarrow \hat{a}^+ \quad (18.31)$$

будет иметь классическим пределом данную классическую динамику. Коммутационное соотношение:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (18.32)$$

Перейдём к квантованию поля. Пусть есть куб с ребром L с периодическими граничными условиями (четырёхмерный тор) (См. рис. 18.3). Считаем, что внутри куба нет токов и зарядов.

Найдём векторный потенциал поля внутри куба. Имеем:

$$A_0 = 0; \quad \operatorname{div} \vec{A} = 0 \quad (18.33)$$

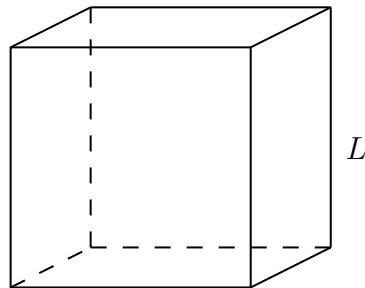


Рис. 18.3. Куб с периодическими граничными условиями, в котором находится электромагнитное поле

Из уравнений Максвелла:

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \bar{A} \\ \bar{H} &= \operatorname{rot} \bar{A}\end{aligned}\quad (18.34)$$

Тогда:

$$\bar{A} = \begin{cases} \bar{e}_x C \cos(k \cdot z - \omega_k t + \varphi); \\ \bar{e}_y \dots \end{cases}, \quad (18.35)$$

где

$$k = \frac{2\pi}{L} m_z \quad (18.36)$$

Тогда для векторного потенциала запишем:

$$\bar{A}(x, t) = \sum_{k,p} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \cdot \bar{e}_{\bar{k},p} \cdot \left[\alpha_{\bar{k},p} \cdot e^{i\bar{k}\bar{x}} \cdot e^{-i\omega_k t} + \alpha_{\bar{k},p}^* e^{-i\bar{k}\bar{x}} e^{i\omega_k t} \right], \quad (18.37)$$

где

$$\bar{k} = \frac{2\pi}{L} (m_x, m_y, m_z); \quad \omega_k = |\bar{k}| \cdot c \quad (18.38)$$

К каждому k привязаны два вектора поляризации: $\bar{e}_{k,1}$ и $\bar{e}_{k,2}$, которые обычно рисуют по принятому соглашению (См. рис. 18.4).

Замечание

В квантовой теории поля вместо $\bar{e}_{k,1}$ и $\bar{e}_{k,2}$ работают с конструкцией: $\frac{\bar{e}_1 \pm i\bar{e}_2}{\sqrt{2}}$.

Если энергия системы:

$$W = \sum_{k,p} \hbar \omega_k \alpha_{\bar{k},p}^* \alpha_{\bar{k},p}, \quad (18.39)$$

то $\alpha_{\bar{k},p} \rightarrow \hat{a}_{\bar{k},p}$; $\alpha_{\bar{k},p}^* \rightarrow \hat{a}_{\bar{k},p}^+$ - осцилляторные операторы рождения и уничтожения в классическом пределе.

Тогда для квантовых операторов:

$$[\hat{a}_{\bar{k},p}, \hat{a}_{\bar{k}',p'}] = 0 \quad (18.40)$$

$$[\hat{a}_{\bar{k},p}, \hat{a}_{\bar{k}',p'}^+] = \delta_{\bar{k},\bar{k}'} \delta_{pp'}, \quad (18.41)$$

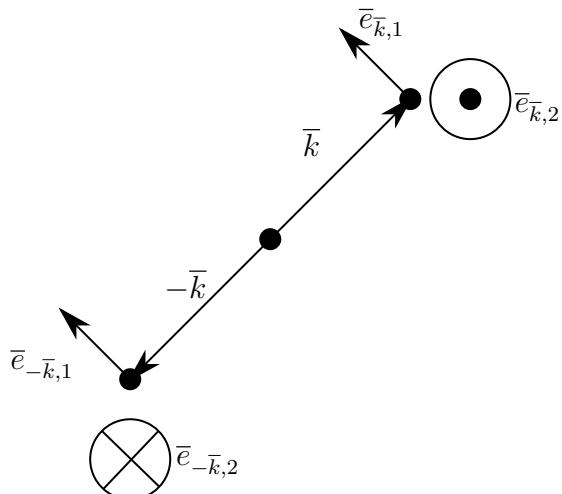


Рис. 18.4. Стандартное обозначение векторов согласно общепринятым соглашениям

где

$$\delta_{\bar{k}, \bar{k}'} \rightarrow \delta_{m_x, m'_x}, \delta_{m_y, m'_y}, \delta_{m_z, m'_z} \quad (18.42)$$

Энергия излучения этого поля, замкнутого в этот куб:

$$W = \int \frac{\overline{E}^2 + \overline{H}^2}{8\pi} d\bar{x} \quad (18.43)$$

Вспомним, что:

$$1) \quad \int_{L^3} e^{i\bar{k}\bar{x} - i\bar{k}'x} d\bar{x} = L^3 \delta_{\bar{k}, \bar{k}'} \quad (18.44)$$

$$2) \quad \bar{e}_{\bar{k}, p} \cdot \bar{e}_{\bar{k}, p'} = \delta_{pp'} \quad (18.45)$$

$$3) \quad \bar{e}_{\bar{k}, p} \bar{e}_{-\bar{k}, p'} = \pm \delta_{pp'}, \quad (18.46)$$

где «+» в (18.46) ставится для первых полярных векторов, а «-» - для вторых.

Импульс поля излучения в кубе с ребром L , исходя из соображения, аналогичного расчёту давления в статистике и термодинамике (См. рис. 18.5), будет:

$$\bar{p} = \int_{L^3} d\bar{x} \frac{1}{c^2} \frac{c}{4\pi} [\overline{E} \times \overline{H}] \quad (18.47)$$

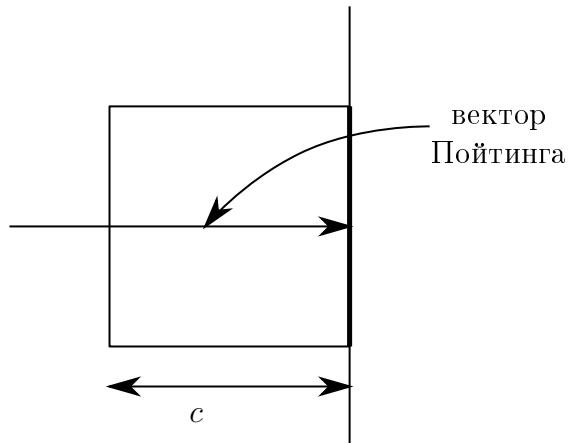


Рис. 18.5. Импульс излучения, передаваемый стенке единичной площади в единицу времени

Лекция 19

Квантование электромагнитного поля

Получили, что вместо $\alpha_{\bar{k}p}$, которые задают амплитуду и фазу электромагнитной волны нужно писать операторы $\hat{a}_{\bar{k}p}$. Получили представление электромагнитной волны, как бесконечную совокупность гармонических осцилляторов. Поэтому:

$$\left[\hat{a}_{\bar{k}p}, \hat{a}_{\bar{k}'p'} \right] = 0; \quad (19.1)$$

$$\left[\hat{a}_{\bar{k}p}, \hat{a}_{\bar{k}'p'}^+ \right] = \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{pp'} \quad (19.2)$$

Тогда для оператора векторного потенциала:

$$\widehat{\vec{A}}_\Gamma(\bar{x}, t) = \sum_{\bar{k}, p} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot \left(e^{i\bar{k}\bar{x}} \hat{a}_{\bar{k}p} e^{-i\omega_k t} + e^{-i\bar{k}\bar{x}} \hat{a}_{\bar{k}p}^+ e^{i\omega_k t} \right), \quad (19.3)$$

где $\hat{a}_{\bar{k}p} e^{-i\omega_k t}$; $\hat{a}_{\bar{k}p}^+ e^{i\omega_k t}$ - решения уравнения Гейзенберга. Если попробовать найти гамильтониан системы, то он будет иметь вид:

$$\widehat{H} = \int_{L^3} d\bar{x} \frac{\widehat{\vec{E}}^2 + \widehat{\vec{H}}^2}{8\pi} = \sum_{\bar{k}, p} \hbar\omega_k \left(\frac{\hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p}}{2} + \frac{\hat{a}_{\bar{k}p} \hat{a}_{\bar{k}p}^+}{2} \right) \quad (19.4)$$

Вычислим импульс:

$$\widehat{\vec{p}} = \int_{L^3} d\bar{x} \frac{1}{4\pi c} \left[\widehat{\vec{E}} \times \widehat{\vec{H}} \right] \quad (19.5)$$

Проведём соответствующую выкладку:

$$\widehat{\vec{p}} = \sum_{\bar{k}, p} \sum_{\bar{k}', p'} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega'_{k'} L^3}} \int d\bar{x} \cdot \frac{1}{4\pi c} \cdot \left[\bar{e}_k \times [\bar{k}' \times \bar{e}_{\bar{k}'p'}] \right] \frac{i\omega_k}{c} i \quad (19.6)$$

Разложим подчёркнутое двойное векторное произведение:

$$\bar{k}' \cdot (\bar{e}_{\bar{k}p} \bar{e}_{\bar{k}'p'}) - \bar{e}_{\bar{k}'p'} (\bar{e}_{\bar{k}p} \bar{k}') \quad (19.7)$$

Расписывая то, что в круглых скобках в (19.7), получим для одной:

$$\left(e^{i\bar{k}\bar{x}-i\omega_k t} \hat{a}_{\bar{k}p} - e^{-i\bar{k}\bar{x}+i\omega_k t} \hat{a}_{\bar{k}p}^+ \right) \quad (19.8)$$

для другой:

$$\left(e^{i\bar{k}'\bar{x}-i\omega_{k'}t} \hat{a}_{\bar{k}p} - e^{-i\bar{k}'\bar{x}+i\omega_{k'}t} \hat{a}_{\bar{k}'p'}^+ \right) \quad (19.9)$$

Члены при операторах уничтожения в (19.8), (19.9) при произведении должны занулиться, поскольку импульс при свободном движении фотонов - это интеграл

движения, и от времени он не зависит. Аналогично с членами при операторах рождения. Остаются только перекрёстные слагаемые. Распишем перекрёстное слагаемое для подчёркнутых множителей в (19.8), (19.9). Заметим, что:

$$\int d\bar{x} e^{-i\bar{k}\bar{x}+i\bar{k}'\bar{x}} = \delta_{\bar{k}\bar{k}'} L^3 \Rightarrow \bar{k}' = \bar{k} \Rightarrow (\bar{e}_{\bar{k}p} \bar{e}_{\bar{k}'p'}) = 0 \quad (19.10)$$

Аналогично для p :

$$(\bar{e}_{\bar{k}p} \bar{e}_{\bar{k}'p'}) = \delta_{pp'} \Rightarrow p' = p \quad (19.11)$$

Тогда для подчёркнутых членов получим:

$$\sum_{\bar{k},p} \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k} \bar{k} \frac{1}{4\pi\zeta} (-1) \frac{\omega_k}{\zeta} \cdot \left(-\hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p}^- \right) \cdot e^{i\omega_k t - i\omega_k t} = \sum_{\bar{k},p} \hbar \bar{k} \frac{1}{2} \hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p}^- \quad (19.12)$$

Аналогично для другого перекрёстного слагаемого:

$$\sum_{\bar{k},p} \hbar \bar{k} \frac{1}{2} \hat{a}_{\bar{k}p}^- \hat{a}_{\bar{k}p}^+ \quad (19.13)$$

Формально (19.12) и (19.13) не равны, поскольку:

$$[\hat{a}_{\bar{k}p}, \hat{a}_{\bar{k}p}^+] = 1 \Rightarrow \hat{a}_{\bar{k}p} \hat{a}_{\bar{k}p}^+ = \hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p} + 1 \quad (19.14)$$

Однако в сумме на каждый положительный \bar{k} найдётся такой же, но отрицательный, поэтому единичка зануляется. В итоге получим:

$$\sum_{\bar{k},p} \hbar \bar{k} \hat{a}_{\bar{k}p}^- \hat{a}_{\bar{k}p}^+ \quad (19.15)$$

Убедимся в том, что неперекрёстные слагаемые в (19.8), (19.9) равны нулю. Заметим, что:

$$\int d\bar{x} e^{i\bar{k}\bar{x}+i\bar{k}'\bar{x}} = \delta_{\bar{k}'-\bar{k}} L^3 \Rightarrow \bar{k}' = -\bar{k} \quad (19.16)$$

Тогда в векторной части выражения:

$$(-\bar{k}) \cdot \underbrace{(\bar{e}_{\bar{k}p} \cdot \bar{e}_{-\bar{k}p'})}_{=\pm\delta_{pp'}} - \bar{e}_{\bar{k}p} \underbrace{(\bar{k} \cdot \bar{e}_{-\bar{k}p'})}_{=0} \quad (19.17)$$

Тогда возникнет сумма:

$$\sum_k e^{-2i\omega_k t} \underbrace{\hat{a}_{\bar{k}p}^- \hat{a}_{-\bar{k}p}^+}_{=\hat{a}_{-\bar{k}p} \hat{a}_{\bar{k}p}^-} \cdot \bar{k} = 0, \quad (19.18)$$

поскольку для каждого \bar{k} в сумме будут находиться слагаемые с $-\bar{k}$.

Другое неперекрёстное слагаемое зануляется аналогично. Окончательно получим:

$$\hat{\bar{p}} = \int_{L^3} d\bar{x} \frac{1}{4\pi c} [\hat{\bar{E}} \times \hat{\bar{H}}] = \sum_{\bar{k}, p} \hbar \bar{k} \hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p} = \bar{p} \quad (19.19)$$

Аналогичными рассуждениями получим для гамильтониана:

$$\hat{H} = \sum_{\bar{k}, p} \hbar \omega_k \left(\hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p} + \frac{1}{2} \right) \quad (19.20)$$

В наших рассуждениях (19.20) представляет собой бесконечную совокупность гармонических осцилляторов. Вакуум гармонического осциллятора - это:

$$\hat{a}_{\bar{k}p} |0\rangle = 0 \quad (19.21)$$

Тогда в случае вакуума (19.20) будет иметь вид:

$$\hat{H} |0\rangle = \underbrace{\sum_{\bar{k}, p} \hbar \omega_k}_{\rightarrow \infty} \cdot \frac{1}{2} |0\rangle \quad (19.22)$$

получаем расходимость, которая в данном случае просто решается перенормированной. Вычтем эту бесконечность из гамильтониана, тогда $\frac{1}{2}$ в (19.20) уйдёт, и получится, что:

$$\hat{H} |0\rangle = \sum_{\bar{k}, p} 0 |0\rangle = 0 \quad (19.23)$$

Сделаем интерпретацию полученного выше в терминах вторичного квантования. Построим из вакуума следующее возбуждение:

$$\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0}^+ |0\rangle = |\psi\rangle \quad (19.24)$$

Рассмотрим выражение:

$$\hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p} \quad (19.25)$$

В терминах осцилляторов (19.25) имеет смысл N -го возбуждения данной оси. В терминах вторичного квантования (19.25) - это оператор числа частиц:

$$\hat{a}_{\bar{k}p}^+ \hat{a}_{\bar{k}p} = \hat{N}_{\bar{k}p} \quad (19.26)$$

Тогда в терминах вторичного квантования получим:

$$\hat{H} |\psi\rangle = \hbar \omega_{\bar{k}_0} |\psi\rangle \quad (19.27)$$

$$\hat{\bar{p}} |\psi\rangle = \hbar \bar{k}_0 |\psi\rangle \quad (19.28)$$

Таким образом, можно считать квантование электромагнитного поля вторичным квантованием, где $\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0}^+$ - это оператор рождения фотона.

Построим двухфотонное состояние:

$$\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0}^+ \hat{a}_{\bar{k}_1 p_1}^+ |0\rangle \Rightarrow \frac{E = \hbar\omega_{k_0} + \hbar\omega_{k_1}}{\bar{p} = \hbar\bar{k}_0 + \hbar\bar{k}_1} \quad (19.29)$$

Аналогично можно построить два фотона в одном состоянии:

$$\frac{\left(\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0}^+\right)^2}{\sqrt{2!}} |0\rangle \quad (19.30)$$

Таким образом, для квантования электромагнитного поля подходят обе интерпретации (и фотоны, и бесконечное число осцилляторов).

Убедимся, что отсюда легко можно получить классическую электромагнитную волну. Построим обобщённое когерентное состояние (отранслируем вакуум в пространстве по оси):

$$|\psi\rangle \equiv |\alpha_{\bar{k}_0 p_0}\rangle = e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} e^{\alpha\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0}^+} |0\rangle \quad (19.31)$$

Если $\bar{k}p \neq \bar{k}_0 p_0$, то поскольку:

$$\left[\hat{a}_{\bar{k}p}, e^{\alpha\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0}^+} \right] = 0, \quad (19.32)$$

то

$$\hat{a}_{\bar{k}p} |\alpha_{\bar{k}_0 p_0}\rangle = 0 \quad (19.33)$$

и

$$\hat{a}_{\bar{k}_0 p_0} |\alpha_{\bar{k}_0 p_0}\rangle \equiv \alpha |\alpha_{\bar{k}_0 p_0}\rangle \quad (19.34)$$

Аналогично для креста:

$$\langle \alpha_{\bar{k}_0 p_0} | \hat{a}_{\bar{k}p}^+ = 0 \quad (19.35)$$

Считаем, что

$$\alpha = |\alpha| e^{i\varphi} \quad (19.36)$$

С учётом (19.33), (19.34), (19.35), (19.36) найдём среднее значение оператора векторного потенциала в таком когерентном состоянии:

$$\begin{aligned} \langle \alpha_{\bar{k}_0 p_0} | \widehat{A}_\Gamma(\bar{x}, t) | \alpha_{\bar{k}_0 p_0} \rangle &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \bar{e}_{\bar{k}_0 p_0} \left(e^{i\bar{k}_0 \bar{x} - i\omega_{\bar{k}_0} t} \cdot \alpha + e^{-i\bar{k}_0 \bar{x} + i\omega_{\bar{k}_0} t} \alpha^* \right) = \\ &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\bar{k}_0} L^3}} \bar{e}_{\bar{k}_0 p_0} \cdot 2 |\alpha| \cdot \cos(\bar{k}_0 \bar{x} - \omega_{\bar{k}_0} t + \varphi) \end{aligned} \quad (19.37)$$

Заданием $|\alpha|$ нужно убрать в (19.37) \hbar и L^3 , чтобы перейти в классику. Заметим, что (19.37) – это плоская волна. Допустим, нужно задать две плоские волны: $|\alpha_{\bar{k}_0 p_0}\rangle; |\beta_{\bar{k}_1 p_1}\rangle$. Если построить суперпозицию:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |\alpha_{\bar{k}_0 p_0}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\beta_{\bar{k}_1 p_1}\rangle \quad (19.38)$$

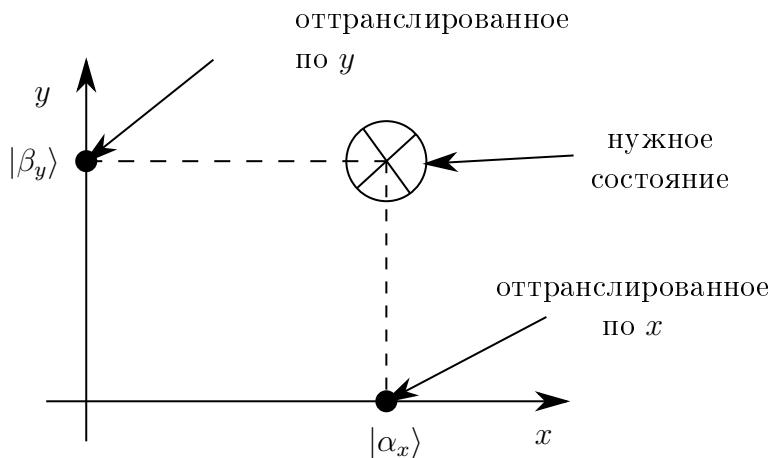


Рис. 19.1. Состояния соответствующие одной плоской волне оттранслированы по осям, нужное состояние оттранслировано по двум осям сразу

тогда в половине случаев будет наблюдаться одна волна, а в половине - другая.

Чтобы построить две плоские волны, представим это состояние, как двумерный гармонический осциллятор (См. рис. 19.1). Тогда, чтобы получить две плоские волны, нужно оттранслировать вакуум сразу и по оси x и по оси y :

$$e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} e^{-\frac{\beta\beta^*}{2}} e^{\alpha\hat{a}_x^+} e^{\beta\hat{a}_y^+} |0\rangle \quad (19.39)$$

Аналогично окончательно получаем, что классический принцип суперпозиции имеет вид:

$$e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} e^{-\frac{\beta\beta^*}{2}} e^{\alpha\hat{a}_{k_0 p_0}^+} e^{\beta\hat{a}_{k_1 p_1}^+} |0\rangle \quad (19.40)$$

Задача излучения

Пусть имеем заряд в состоянии $|\psi_1\rangle$ с энергией E_1 , а чуть ниже по энергии находится состояние $|\psi_2\rangle$ с энергией E_2 . Зададимся вопросом, можно ли из состояния $|\psi_1\rangle$ перейти в состояние $|\psi_2\rangle$, излучив фотон?

Кроме заряда в системе есть электромагнитное поле (вакуум) $|0\rangle$. Пусть изначально был вакуум $|0\rangle$, в котором зародился фотон $\hat{a}_{kp}^+ |0\rangle$.

Золотое правило Ферми даёт в таком случае ненулевую скорость перехода, если разница энергий равна $\hbar\omega_k$.

Аналогично данной решаются задачи с вынужденным излучением/поглощением:

$$\frac{\left(\hat{a}_{kp}^+\right)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle \leftrightarrow \frac{\left(\hat{a}_{kp}^+\right)^{N+1}}{\sqrt{(N+1)!}} |0\rangle \quad (19.41)$$

Будем считать, что у нашей частицы нет спина, тогда гамильтониан взаимодействия фотона и электромагнитного поля запишем, как:

$$\frac{(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2}{2m} - 2\mu_0 S \vec{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e}{mc}\vec{p}\vec{A} + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 \quad (19.42)$$

В (19.42) подчёркнутое одной чертой называют однофотонным слагаемым (поскольку \widehat{A} содержит один оператор рождения фотона), а подчёркнутое двумя чертами - двухфотонным слагаемым. Двухфотонное слагаемое обычно не рассматривается.

Таким образом гамильтониан возмущения в представлении Гейзенберга имеет вид:

$$\widehat{H}_I = -\frac{e}{mc} \widehat{\vec{p}} \cdot \widehat{\vec{A}}(\widehat{\vec{x}}, t) \quad (19.43)$$

Поскольку в золотом правиле Ферми используется представление Шрёдингера для операторов, запишем (19.43) в представлении Шрёдингера:

$$\widehat{H}_I = -\frac{e}{mc} \widehat{\vec{p}} \cdot \widehat{\vec{A}}(\widehat{\vec{x}}, t=0) \quad (19.44)$$

Лекция 20

Квантование электромагнитного поля

Задача излучения

С помощью золотого правила Ферми имеем:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{2} \sum_m \left| \langle \psi_m | \hat{H}_I | \psi_n \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_m - E_n) \quad (20.1)$$

Вспомним, что

$$|\psi_n\rangle = |\psi_1\rangle |0\rangle, \quad (20.2)$$

где $|0\rangle$ - вакуум, $|\psi_1\rangle$ - возбуждённое состояние. Тогда

$$E_n = E_1 + 0 \quad (20.3)$$

Конечное состояние:

$$|\psi_m\rangle = |\psi_2\rangle \hat{a}_{\vec{k}p}^+ |0\rangle \quad (20.4)$$

С энергией:

$$E_m = E_2 + \hbar\omega_{\vec{k}} \quad (20.5)$$

Гамильтониан возмущения:

$$\hat{H}_I = -\frac{e}{mc} \bar{p} \hat{A}(\bar{x}, t=0) \quad (20.6)$$

Подставляя (20.2) (20.3), (20.4), (20.5), (20.6) в (20.1), получим:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}, p} \left| \langle \psi_2 | \langle 0 | \hat{a}_{\vec{k}p}^- \cdot \left(-\frac{e}{mc} \bar{p} \right) \cdot \sum_{\vec{k}', p'} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{2L^3\omega_{\vec{k}'}}} \bar{e}_{\vec{k}' p'}^- \cdot \left[e^{i\vec{k}'\bar{x}} \hat{a}_{\vec{k}' p'}^- + e^{-i\vec{k}'\bar{x}} \hat{a}_{\vec{k}' p'}^+ \right] \cdot |\psi_1\rangle |0\rangle \right|^2 \cdot \delta(E_2 + \hbar\omega_{\vec{k}} - E_1), \quad (20.7)$$

поскольку

$$\hat{a}_{\vec{k}' p'}^- |0\rangle = 0.$$

Подчёркнутые в (20.7) слагаемые относятся к электромагнитному полю.

Вычислим

$$\langle 0 | \hat{a}_{\vec{k}p}^- \hat{a}_{\vec{k}' p'}^+ | 0 \rangle = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{pp'} \quad (20.8)$$

Напомним, что:

$$\bar{k} = \frac{2\pi}{2} (n_x, n_y, n_z) \quad (20.9)$$

Значит интегрирование $\int d^3\bar{k}$ заменяется суммированием $\sum_{n_x, n_y, n_z} \cdot \left(\frac{2\pi}{2} \right)^3$. Тогда

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int k^2 dk d\Omega_k \sum_p \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \left(-\frac{e}{mc} \bar{p} \right) \bar{p} \cdot \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \cdot \bar{e}_{\vec{k}p}^- \cdot e^{-i\vec{k}\bar{x}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \cdot \delta(E_2 + \hbar k c - E_1) \quad (20.10)$$

Вспомним, что если $f(x_0) = 0$, то

$$\int dx \delta(f(x)) = \frac{1}{|f'(x_0)|} \quad (20.11)$$

Тогда

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{k^2}{\hbar c} d\Omega_k \sum_p \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \left(-\frac{e}{m} \right) \bar{p} \cdot \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_k}} \cdot \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot e^{-i\bar{k}\bar{x}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \quad (20.12)$$

Поскольку

$$\hbar\omega_k = E_1 - E_2; \quad k^2 = \frac{\omega_k^2}{c^2},$$

то (20.12) примет вид

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2 \omega_k}{2\pi\hbar c^3} \cdot \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hat{\bar{p}}}{m} \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot e^{-i\bar{k}\bar{x}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \quad (20.13)$$

Из (20.13) нетрудно увидеть, что для « $s - s$ » переходов матричные элементы тождественно равны нулю (то есть они не происходят).

Получим выражение для интенсивности излучения. Поскольку в правой части (20.13) записано выражение для числа фотонов, то домножая на $\hbar\omega_k$ получим интенсивность:

$$I = \frac{e^2 \omega_k^2}{2\pi c^3} \cdot \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hat{\bar{p}}}{m} \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot e^{-i\bar{k}\bar{x}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \quad (20.14)$$

Интенсивность излучения с данной поляризацией получается из (20.14) без суммирования по всем поляризациям:

$$I_p = \frac{e^2 \omega_k^2}{2\pi c^3} \cdot \int d\Omega_k \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hat{\bar{p}}}{m} \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot e^{-i\bar{k}\bar{x}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \quad (20.15)$$

Интенсивность излучения в направлении конкретного телесного угла без интегрирования по телесным углам соответственно. Таким образом, получим

$$\frac{dI_p}{d\Omega} = \frac{e^2 \omega_k^2}{2\pi c^3} \cdot \left| \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hat{\bar{p}}}{m} \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot e^{-i\bar{k}\bar{x}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \quad (20.16)$$

Избавимся от экспоненты в выражении для скорости перехода с помощью мультипольных разложений электродинамики. При мультипольном разложении в электростатике размер зарядовой области с какой-то плотностью заряда a сравнивается с расстоянием наблюдения R , и разложение ведётся по $\frac{a}{R}$ при $\frac{a}{R} \ll 1$. Аналогично происходит при мультипольном разложении в магнитостатике. При мультипольном разложении скорость колебания заряда v сравнивается со скоростью света c , домножив дробь на период колебаний T . Учитывая, что размер системы $a = v \cdot T$, а длина волны излучения $\lambda = c \cdot T$, получим:

$$\frac{v}{c} = \frac{v \cdot T}{c \cdot T} = \frac{a}{\lambda} = ka \ll 1 \quad (20.17)$$

Аналогично мультипольным разложениям считаем, что $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ локализованы в области размера a , то есть $|\bar{x}| < a \Rightarrow \bar{k}\bar{x} \ll 1$. Тогда разложим нашу экспоненту в ряд:

$$e^{-i\bar{k}\bar{x}} = \underbrace{1}_{E_1} - \underbrace{i\bar{k}\bar{x}}_{E_2, M_1} + \dots, \quad (20.18)$$

где символом E_1 обозначено слагаемое, которое содержит член, соответствующий электрическому дипольному приближению, а символами E_2, M_1 - электрическому квадрупольному и магнитному дипольному соответственно. Вычислим для электрического дипольного:

$$\left\langle \psi_1 \left| \frac{\hat{p}}{m} \cdot \vec{e}_{\bar{k}p} \cdot 1 \right| \psi_1 \right\rangle \quad (20.19)$$

Вспомним, что

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) \quad (20.20)$$

Заметим, что

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \left[\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x) \right] = i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \quad (20.21)$$

С учётом (20.21) выражение (20.19) примет вид:

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hat{p}}{m} \right| \psi_1 \right\rangle \vec{e}_{\bar{k}p} &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_2 | [\hat{x}, \hat{H}] | \psi_1 \rangle \vec{e}_{\bar{k}p} = \left\langle \underline{\underline{\psi}}_2 \left| \hat{x} \hat{H} - \hat{H} \hat{x} \right| \underline{\underline{\psi}}_1 \right\rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_2 | \hat{x} | \psi_1 \rangle \underbrace{(E_1 - E_2)}_{\omega_k} \vec{e}_{\bar{k}p} \end{aligned} \quad (20.22)$$

Таким образом для электрического дипольного приближения получим:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2 \omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \langle \psi_2 | \hat{x} | \psi_1 \rangle \cdot \vec{e}_{\bar{k}p} \right|^2 \quad (20.23)$$

Аналогично находятся выражения для электрического квадрупольного (E_2) и магнитного дипольного (M_1) приближений, однако в них стоит перейти в представление по компонентам векторов:

$$(\hat{\vec{p}}, \vec{e}_{\bar{k}p}) \cdot (\bar{k}, \bar{x}) = p_a (e_{\bar{k}p})_a k_x x_b = (e_{\bar{k}p})_a k_b \left[\underbrace{\frac{p_a x_b + p_b x_a}{2}}_{E_2} + \underbrace{\frac{p_a x_b - p_b x_a}{2}}_{M_1} \right] \quad (20.24)$$

и использовать коммутатор

$$[\hat{x}_a \cdot \hat{x}_b, \hat{H}] \quad (20.25)$$

Таким образом, для электрического квадрупольного получится:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2 \omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| \frac{1}{2} (l_{\bar{k}p})_a k_b \cdot \left\langle \psi_2 \left| \underbrace{\hat{x}_a \hat{x}_b - \frac{1}{3} \delta_{ab} \hat{x}^2}_{\hat{Q}_{ab}} \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2, \quad (20.26)$$



поскольку

$$(e_{\bar{k}p})_a k_b \delta_{ab} = \bar{e}_{\bar{k}p} \cdot \bar{k} = 0 \quad (20.27)$$

Для магнитного дипольного:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2 \omega_k}{2\pi \hbar c^3} \sum_p \int d\Omega_k \cdot \left| [\bar{e}_{\bar{k}p} \times \bar{k}] \left\langle \psi_2 \left| \frac{\hbar}{2m} (\hat{l} + 2\hat{s}) \right| \psi_1 \right\rangle \right|^2 \quad (20.28)$$

Итак, получили выражения для скорости перехода при излучении $(|\psi_1\rangle |0\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle \hat{a}_{\bar{k}p}^+ |0\rangle)$. При поглощении обкладки меняются местами, а оператор рождения меняется на оператор уничтожения.

Для задачи вынужденного излучения:

$$|\psi_1\rangle \frac{(\hat{a}_{\bar{k}p}^+)^N}{\sqrt{N!}} |0\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle \frac{(\hat{a}_{\bar{k}p}^+)^{(N+1)}}{\sqrt{(N+1)!}} |0\rangle$$

Скорость вынужденного излучения будет $\sim (\sqrt{N+1})^2 \sim \hbar\omega(N+1)$.

Квантовые флюктуации. Нулевой шум

Как мы знаем, когерентное состояние - это оттранслированный вакуум:

$$e^{-\frac{\alpha\alpha^*}{2}} e^{\alpha\hat{a}_{\bar{k}0p_0}^+} |0\rangle \quad (20.29)$$

Зададимся вопросом, какая неопределенность электромагнитного поля в этом состоянии?

Имеем:

$$\hat{a}_{\bar{k}p} |0\rangle = 0 \quad \text{и} \quad \langle 0 | \hat{a}_{\bar{k}p}^+ = 0 \quad (20.30)$$

Тогда для векторного потенциала найдём, что

$$\langle 0 | \hat{A}_z | 0 \rangle = 0 \quad (20.31)$$

Это значит, что дисперсия z -компоненты векторного потенциала равна среднему её квадрата. Вычислим её:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{A}_z^2 | 0 \rangle &= \langle 0 | \sum_{k,p} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} (\bar{e}_{\bar{k}p})_z \cdot \left(e^{i\bar{k}\bar{x}-i\omega_k t} \hat{a}_{\bar{k}p} + \cancel{e^{i\bar{k}\bar{x}+i\omega_k t} \hat{a}_{\bar{k}p}^+} \right) \cdot \sum_{\bar{k}',p'} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{k'} L^3}} (\bar{e}_{\bar{k}'p'})_z \cdot \\ &\quad \cdot \left(e^{-i\bar{k}'\bar{x}-i\omega_{k'} t} \hat{a}_{\bar{k}'p'}^+ + \cancel{e^{-i\bar{k}'\bar{x}+i\omega_{k'} t} \hat{a}_{\bar{k}'p'}^+} \right) \cdot |0\rangle, \end{aligned} \quad (20.32)$$

где слагаемые вычеркнуты по причине того, что дают тождественный нуль при действии на вакуум. Вспомним, что

$$\langle 0 | \hat{a}_{\bar{k}p} \hat{a}_{\bar{k}'p'}^+ | 0 \rangle = \delta_{\bar{k}\bar{k}'} \delta_{pp'} \quad (20.33)$$

Тогда (20.32) для одной поляризации примет вид:

$$\begin{aligned}\langle 0 | \hat{A}_z^2 | 0 \rangle &= \sum_{\bar{k}, p} \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3} [(\bar{e}_{\bar{k}p})_z]^2 = \sum_{\bar{k}} \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3} ((\bar{e}_{\bar{k}1})_z)^2 = \\ &= \int k^3 dk d\Omega_k \frac{L^3}{(2\pi)^3} \cdot \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3} \cdot \sin^2 \theta = \int k^2 dk \frac{8\pi}{3} \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \cdot \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3} \quad (20.34)\end{aligned}$$

Нетрудно увидеть, что интеграл в (20.34) расходится. То есть по каждой из гармоник неопределённость имеет масштабы постоянной Планка, но по всем сразу даёт расходящийся интеграл. Однако приборы не замечают такую неопределённость, поскольку не могут реагировать сразу на все гармоники. То есть, неопределённость электромагнитного поля зависит от восприимчивости прибора к разным гармоникам:

$$D\{E_z\} = \int k^2 dk \frac{\omega_k^2}{c^2} \frac{L^3}{(2\pi)^3} \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3} \frac{8\pi}{3} \cdot f(k), \quad (20.35)$$

где $f(k)$ - функция прибора.

Лекция 21

Частица Дирака

Рассмотрим гамильтониан (гамильтониан Дирака):

$$\hat{H}_{\text{Д.}} = \hat{\alpha} \cdot c \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e \hat{\vec{A}}}{c} \right) + e\varphi + \beta mc^2, \quad (21.1)$$

где $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \nabla$ - импульс; φ - скалярный потенциал; $\hat{\vec{A}}$ - векторный потенциал;

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ - блочная матрица} \quad (21.2)$$

Напомним, что в блочных матрицах правила сложения и умножения совпадают с правилами в обычных матрицах:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AA' + BC' & AB' + BD' \\ CA' + DC' & CB' + DD' \end{pmatrix}; \quad (21.3)$$

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (21.4)$$

где σ_i - матрицы Паули. Например,

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (21.5)$$

Гамильтониан (21.1) не инвариантен относительно поворота, поскольку \vec{p} не инвариантен относительно поворота. Нужно, что-то, что в слагаемом $\hat{\alpha} \hat{\vec{p}}$ будет поворачивать $\hat{\alpha}$ и суммировать его с \vec{l} , давая в результате полный момент, относительно которого гамильтониан (21.1) инвариантен. Так возникает понятие спина частицы Дирака.

Обычный спин:

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \vec{\sigma}, \quad (21.6)$$

при котором

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (21.7)$$

Так спин частицы Дирака:

$$\hat{\Sigma}_i \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix} \quad (21.8)$$

Тогда

$$[\hat{\Sigma}_i, \hat{\Sigma}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{\Sigma}_k \quad (21.9)$$

При этом

$$\left[\widehat{\Sigma}_i, \widehat{\alpha}_j \right] = i\epsilon_{ijk} \widehat{\alpha}_k \quad (21.10)$$

Чтобы повернуть частицу Дирака нужно проводить поворот:

$$e^{i\widehat{l}\overline{n}\varphi} e^{i\widehat{\Sigma}\overline{n}\varphi}, \quad (21.11)$$

относительно которого гамильтониан Дирака инвариантен.

Свободная частица Дирака

Рассмотрим свободную частицу Дирака ($\varphi = 0; \overline{A} = 0$). У частицы Дирака есть три интеграла движения (четвёртый рассматривать не будем):

- 1) \widehat{H}
- 2) $\widehat{\overline{p}}$
- 3) λ - спиральность:

$$\widehat{\lambda} = \widehat{\Sigma} \widehat{\overline{p}} \quad (21.12)$$

Имеем

$$\widehat{s} = \frac{1}{2}\widehat{\sigma}; \quad \widehat{s}_n = \frac{1}{2}\overline{n}\widehat{\sigma} \quad (21.13)$$

Пусть есть состояние $|\xi_1\rangle$:

$$|\xi_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (21.14)$$

тогда

$$\widehat{s}_n |\xi_1\rangle = +\frac{1}{2} |\xi_1\rangle \quad (21.15)$$

Пусть есть ещё состояние $|\xi_2\rangle$:

$$|\xi_2\rangle = \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (21.16)$$

тогда

$$\widehat{s}_n |\xi_2\rangle = -\frac{1}{2} |\xi_2\rangle \quad (21.17)$$

Рассмотрим следующую конструкцию:

$$\widehat{\sigma} \overline{q} = q \widehat{\sigma} \overline{n}, \quad (21.18)$$

где \overline{q} - это вектор, который имеет определённое значение (импульса). Тогда

$$\widehat{\sigma} \overline{q} |\xi_1\rangle = +q |\xi_1\rangle \quad (21.19)$$

$$\widehat{\sigma} \overline{q} |\xi_2\rangle = -q |\xi_2\rangle \quad (21.20)$$

Будем искать решение стационарного уравнения Шрёдингера для свободной частицы Дирака:

$$\left(\widehat{\alpha} c \bar{p} + \beta m c^2 \right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} mc^2 - E & \widehat{\sigma} \bar{p} \cdot c \\ \widehat{\sigma} \bar{p} \cdot c & -mc^2 - E \end{pmatrix} |\psi\rangle = 0 \quad (21.21)$$

Ищем решение в виде:

$$|\psi\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \bar{q} \bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} a_q |\xi_1\rangle \\ b_q |\xi_1\rangle \end{pmatrix} \quad (21.22)$$

Тогда

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} mc^2 - E & \widehat{\sigma} \bar{q} c \\ \widehat{\sigma} \bar{q} c & -mc^2 - E \end{pmatrix} \cdot \cancel{\frac{e^{\frac{i}{\hbar} \bar{q} \bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}} \begin{pmatrix} a_q |\xi_1\rangle \\ b_q |\xi_1\rangle \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{cases} (mc^2 - E)a_q |\xi_1\rangle + b_q q c |\xi_1\rangle = 0, \\ q c a_q |\xi_1\rangle + (-E - mc^2)b_q |\xi_1\rangle \cdot b_q = 0; \end{cases} \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{cases} (mc^2 - E)a_q + q c b_q = 0, \\ q c a_q + (-E - mc^2)b_q = 0, \end{cases} \quad (21.23) \end{aligned}$$

где экспонента была сокращена ввиду ненадобности (на неё уже подействовал оператор импульса, превратившись в число)

Из (21.23) понятно, что частица Дирака обладает релятивистской энергией:

$$E^2 - m^2 c^4 = q^2 c^2 \Rightarrow E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + q^2 c^2} \equiv \pm W_q \quad (21.24)$$

Без вывода отметим, что уравнение Дирака релятивистски инвариантно. Нужно нормировать решение, знаем, что:

$$\langle \xi_i | \xi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (21.25)$$

Нужно, чтобы выполнялось условие:

$$|a_q|^2 + |b_q|^2 = 1, \quad (21.26)$$

тогда будет нормировка на дельта-функцию ($\delta(\bar{q} - \bar{q}')$) согласно непрерывному спектру.

Для нормировки нужно подобрать коэффициенты a_q, b_q . Из (21.24) имеем:

$$qc = \sqrt{(W - mc^2)(W + mc^2)} \quad (21.27)$$

Тогда для $E = +W_q$ из (21.23), (21.27) найдём, что

$$\begin{aligned} q c a_q = (E + mc^2)b_q = (W_q + mc^2)b_q \Rightarrow \sqrt{(W_q - mc^2)}a_q = \sqrt{(W_q + mc^2)}b_q \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{cases} a_q = \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}}, \\ b_q = \sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} \end{cases} \quad (21.28) \end{aligned}$$

Аналогично для $E = -W_q$:

$$\begin{aligned} qcb_q = (E - mc^2)a_q = (-W_q - mc^2)a_q \Rightarrow \\ \sqrt{(W_q - mc^2)(W_q + mc^2)}b_q = -a_q(W_q + mc^2) \Rightarrow \\ \Rightarrow \begin{cases} a_q = \sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}}; \\ b_q = \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} \end{cases} \quad (21.29) \end{aligned}$$

Выпишем два решения:

$$|\psi_{q1\pm}\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \\ \sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \end{pmatrix}, \quad (21.30)$$

где подчёркнутый «+» соответствует $E = W_q$, для $E = -W_q$ там будем писать «-».

Тогда

$$\hat{\lambda} = \widehat{\Sigma} \widehat{p} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \bar{\sigma}_p & 0 \\ 0 & \bar{\sigma}_p \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda = \frac{1}{2}q \quad (21.31)$$

Соответственно для $E + -W_q$ имеем:

$$|\psi_{q1-}\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \\ \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \end{pmatrix} \quad (21.32)$$

Учитывая, что

$$\bar{q} \bar{\sigma} |\xi_1\rangle = q |\xi_1\rangle \quad (21.33)$$

$$\bar{q} \bar{\sigma} |\xi_2\rangle = -q |\xi_2\rangle \quad (21.34)$$

для $|\xi_2\rangle$ запишем:

$$|\psi_{q2+}\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} |\xi_2\rangle \\ -\sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} |\xi_2\rangle \end{pmatrix} \quad (21.35)$$

$$\lambda = -\frac{1}{2}q \quad (21.36)$$

$$|\psi_{q2-}\rangle = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \begin{pmatrix} +\sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} |\xi_2\rangle \\ \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} |\xi_2\rangle \end{pmatrix} \quad (21.37)$$

$$\lambda = -\frac{1}{2}q \quad (21.38)$$

Каждый из векторов нормирован на $\delta(\bar{q} - \bar{q}')$. Получаем четыре ортогональных вектора, образующих базис.

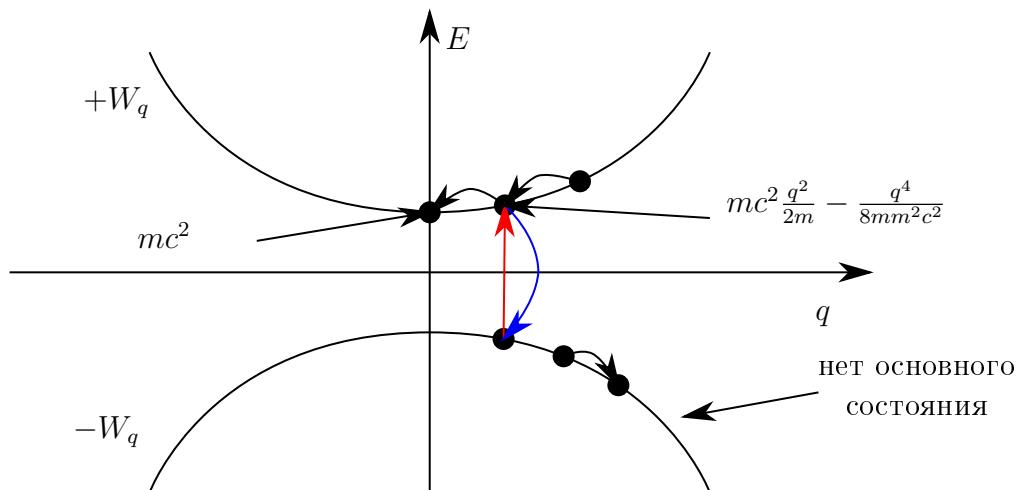


Рис. 21.1. Море Дирака. Имеются две «ветви» состояний с положительной и с отрицательной энергией. В случае положительной энергии, частица находящаяся в каком-то состоянии отличном от энергии mc^2 (энергии покоя) стремиться к состоянию с минимумом энергии. Но в случае «ветви» с отрицательной энергией она стремиться на бесконечность. Чтобы избежать такой нефизичный случай, предполагается, что модель описывает фермионы, а низшая ветвь занята другими частицами (электронами), и поэтому сползание частицы ниже по энергии невозможно в силу запрета Паули. Модель предсказывает рождение электрон-позитронных пар (красная стрелка) и аннигиляцию электрон-позитронной пары с испусканием двух фотонов (синяя стрелка), в таком случае позитрон рассматривается как «дырка». Однако при таком подходе система имеет бесконечный заряд, поэтому ясно, что данная интерпретация не соответствует действительности

Интерпретация вышесказанного дана на рисунке 21.1.

Выясним, как интерпретируется частица Дирака. Запишем для вакуума и рождения, например, электрона в 7-м состоянии:

$$\hat{a}_7^\dagger |0\rangle = |7\rangle \quad (21.39)$$

$$\hat{a}_7 |7\rangle = |0\rangle \quad (21.40)$$

Заметим, что с алгебраической точки зрения нет разницы между операторами рождения и уничтожения, и между $|0\rangle$ и $|7\rangle$, поскольку:

$$[\hat{a}_7, \hat{a}_7^\dagger]_+ = \hat{a}_7 \hat{a}_7^\dagger + \hat{a}_7^\dagger \hat{a}_7 = \delta_{7,7} = 1 \quad (21.41)$$

Тогда если обозначить:

$$\begin{aligned} \hat{a}_7 &= \tilde{\hat{a}}_7^\dagger \\ \hat{a}_7^\dagger &= \tilde{\hat{a}}_7 \\ |0\rangle &= |\tilde{7}\rangle \\ |7\rangle &= |\tilde{0}\rangle \end{aligned}$$

то получим, что

$$\hat{a}_7^+ |\tilde{0}\rangle = \hat{a}_7 |7\rangle = |0\rangle = |\tilde{7}\rangle \quad (21.42)$$

и

$$\hat{a}_7 |\tilde{7}\rangle = \hat{a}_7^+ |0\rangle = |7\rangle = |\tilde{0}\rangle \quad (21.43)$$

То есть, всё сойдётся. Тогда можем записать:

$$\hat{\psi} = \sum_{\bar{q}} |_{\bar{q}1+}\rangle \cdot \hat{a}_{\bar{q}1} + |\psi_{\bar{q}2+}\rangle \hat{a}_{\bar{q}2} + |\psi_{\bar{q}1-}\rangle \hat{d}_{\bar{q}1}^+ + |\psi_{\bar{q}2-}\rangle \hat{d}_{\bar{q}2}^+, \quad (21.44)$$

где \hat{d}^+ - оператор рождения позитрона, а \hat{d} - соответственно оператор уничтожения позитрона.

Данное утверждение позволяет получить положительно определённый гамильтониан:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d\bar{x} \hat{\psi}^+ \cdot \hat{H}_{\text{Д.}} \cdot \left[\sum_{\bar{q}} |_{\bar{q}1+}\rangle \hat{a}_{\bar{q}1} + |\psi_{\bar{q}2+}\rangle \hat{a}_{\bar{q}2} + \right. \\ &\quad \left. + |\psi_{\bar{q}1-}\rangle \hat{d}_{\bar{q}1}^+ + |\psi_{\bar{q}2-}\rangle \hat{d}_{\bar{q}2}^+ \right] = \\ &= \int d\bar{x} \hat{\psi}^+ \cdot \left[\sum_{\bar{q}} W_q |_{\bar{q}1+}\rangle \hat{a}_{\bar{q}1} + W_q |\psi_{\bar{q}2+}\rangle \hat{a}_{\bar{q}2} + \right. \\ &\quad \left. + (-W_q) |\psi_{\bar{q}1-}\rangle \hat{d}_{\bar{q}1}^+ + (-W_q) |\psi_{\bar{q}2-}\rangle \hat{d}_{\bar{q}2}^+ \right] \quad (21.45) \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{\bar{q}} W_q \hat{a}_{\bar{q}1}^+ \hat{a}_{\bar{q}1} + W_q \hat{a}_{\bar{q}2}^+ \hat{a}_{\bar{q}2} - W_q \underbrace{\hat{d}_{\bar{q}1}^+ \hat{d}_{\bar{q}1}^+}_{1-\hat{d}_{\bar{q}1}^+ \hat{d}_{\bar{q}2}} - W_q \underbrace{\hat{d}_{\bar{q}2}^+ \hat{d}_{\bar{q}2}^+}_{1-\hat{d}_{\bar{q}2}^+ \hat{d}_{\bar{q}2}} = \\ &= \sum_{\bar{q}} W_q \left(\hat{a}_{\bar{q}1}^+ \hat{a}_{\bar{q}1} + \hat{a}_{\bar{q}2}^+ \hat{a}_{\bar{q}2} + \hat{d}_{\bar{q}1}^+ \hat{d}_{\bar{q}1} + \hat{d}_{\bar{q}2}^+ \hat{d}_{\bar{q}2} \right) - \cancel{\sum_{\bar{q}} (W_q + W_q)}, \quad (21.46) \end{aligned}$$

где зачёркнуто постоянное слагаемое, в связи с тем, что нам интересно относительное изменение уровня энергии, а не его абсолютное значение.

Скорость частицы Дирака

$$\dot{\hat{x}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{i}{\hbar} [\widehat{\alpha p c} + \cancel{\beta m c^2}, \hat{x}] \quad (21.47)$$

Вспомним, что

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar\delta_{ij} \quad (21.48)$$

Тогда

$$\dot{\hat{x}} = \frac{i}{\hbar} (-i\hbar) \cdot \hat{\alpha} \cdot c = \hat{\alpha} c \quad (21.49)$$

Убедимся, что (21.49) - это скорость, вычислим

$$\langle \psi_{\bar{q}'1+} | \hat{\alpha} c | \psi_{\bar{q}1+} \rangle = \left\{ \begin{array}{l} \delta_{\bar{q}\bar{q}'} \\ \delta(\bar{q} - \bar{q}') \end{array} \right\} \dots \quad (21.50)$$

Лекция 22

Частица Дирака

Скорость частицы Дирака

Итак, мы получили, что

$$\dot{\hat{x}} = \hat{\bar{\alpha}}c \quad (22.1)$$

Убедимся, что, например, для электрона это - скорость. Для этого нужно сосчитать матричный элемент

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\bar{q}'1+} | \hat{\bar{\alpha}}c | \psi_{\bar{q}1+} \rangle &= \left\{ \begin{array}{l} \delta_{\bar{q}'\bar{q}} \\ \delta(\bar{q}' - \bar{q}) \end{array} \right\} \cdot \left(\sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle, \sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \right) \cdot \\ &\cdot \begin{pmatrix} 0 & \hat{\bar{\sigma}} \cdot c \\ \hat{\bar{\sigma}} \cdot c & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \\ \sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \end{pmatrix} = \\ &= \delta_{\bar{q}'\bar{q}} \cdot 2 \sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} \sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} \cdot \langle \xi_1 | \hat{\bar{\sigma}} | \xi_1 \rangle \cdot c \quad (22.2) \end{aligned}$$

Так как

$$W_q^2 = m^2c^4 + q^2c^2, \quad (22.3)$$

то (22.2) примет вид:

$$\langle \psi_{\bar{q}'1+} | \hat{\bar{\alpha}}c | \psi_{\bar{q}1+} \rangle = \delta_{\bar{q}'\bar{q}} \frac{qc^2}{W_q} \langle \xi_1 | \hat{\bar{\sigma}} | \xi_1 \rangle \quad (22.4)$$

Вспомним, что $|\xi_1\rangle$ определено так, что:

$$\begin{cases} \hat{\bar{\sigma}} \bar{q} |\xi_1\rangle = +q |\xi_1\rangle \\ \text{или} \\ \hat{\bar{\sigma}} \bar{n} |\xi_1\rangle = +1 |\xi_1\rangle \end{cases} \Rightarrow \langle \xi_1 | \hat{\bar{\sigma}} \bar{n} = \langle \xi_1 | \quad (22.5)$$

Вспомним, что

$$\hat{\bar{\sigma}}_i \hat{\bar{\sigma}}_j + \hat{\bar{\sigma}}_j \hat{\bar{\sigma}}_i = 2\delta_{ij} \quad (22.6)$$

Тогда, учитывая (22.5), (22.6), получим

$$\langle \xi_1 | \hat{\bar{\sigma}} | \xi_1 \rangle = \frac{1}{2} \langle \xi_1 | (\hat{\bar{\sigma}} \bar{n}) \hat{\bar{\sigma}} + \hat{\bar{\sigma}} (\hat{\bar{\sigma}} \bar{n}) | \xi_1 \rangle = \frac{1}{2} \langle \xi_1 | 2\bar{n} | \xi_1 \rangle = \bar{n} \cdot \langle \xi_1 | \xi_1 \rangle = \bar{n} \quad (22.7)$$

Таким образом, вспомнив выражения для W_q и \bar{q} , получим для матричного элемента:

$$\langle \psi_{\bar{q}'1+} | \hat{\bar{\alpha}}c | \psi_{\bar{q}1+} \rangle = \delta_{\bar{q}'\bar{q}} \frac{qc^2}{W_q} \cdot \bar{n} = \delta_{\bar{q}'\bar{q}} \frac{\bar{q}c^2}{W_q} = \frac{\cancel{\sqrt{1-\bar{v}^2/c^2}} \cdot \cancel{c^2}}{\cancel{\sqrt{1-\bar{v}^2/c^2}}} = \delta_{\bar{q}'\bar{q}} \bar{v} \quad (22.8)$$

Для отрицательной спиральности получается аналогично.

Нерелятивистский предел для уравнения Дирака

Важно понимать, что нерелятивистский предел для уравнения Дирака - это свойство состояний частицы, а не самого гамильтониана.

Построим нерелятивистское состояние для частицы Дирака, которое является суперпозицией состояний электрона:

$$|\psi\rangle = \int d\bar{q} (c_1(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}1+}\rangle + c_2(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}2+}\rangle) \quad (22.9)$$

Поскольку мы рассматриваем нерелятивистское приближение, то мы считаем, что $q \ll mc$, в этой области коэффициенты c_1, c_2 отличны от нуля. В состоянии (22.9) фигурирует столбец:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{W_q+mc^2}{2W_q}} |\xi_1\rangle \\ \pm \sqrt{\frac{W_q-mc^2}{2W_q}} |\xi_2\rangle \end{pmatrix} \quad (22.10)$$

Заметим, что в нерелятивистском приближении:

$$(W_q + mc^2) \rightarrow q^2 c^2; \quad W_q \rightarrow mc^2 \quad (22.11)$$

с учётом (22.11) и с учётом нерелятивистского приближения ($q \ll mc$) увидим, что

$$\sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} = \sqrt{\frac{(W_q - mc^2)(W_q + mc^2)}{2W_q(W_q + mc^2)}} = \frac{qc}{2mc^2} = \frac{q}{2mc} \rightarrow 0 \quad (22.12)$$

То есть в нулевом приближении (в нулевом приближении по $1/c^0$) нет нижней компоненты у столбца (22.10), то есть:

$$|\psi\rangle = \int d\bar{q} \frac{e^{i\bar{q}\bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \begin{pmatrix} c_1(\bar{q}) |\xi_1\rangle \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\tilde{\psi}\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \quad (22.13)$$

Где $|\tilde{\psi}\rangle$, как окажется далее, волновая функция гамильтониана Паули:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_1(\bar{x}) \\ \tilde{\psi}_2(\bar{x}) \end{pmatrix} \quad (22.14)$$

Таким образом, нерелятивистский предел для уравнения Дирака состоит в следующем (просто совпадение матричных элементов):

$$\langle \chi | \hat{H}_{\text{д.}} | \psi \rangle \equiv \langle \tilde{\chi} | \hat{H}_{\text{eff}} | \tilde{\psi} \rangle, \quad (22.15)$$

где χ, ψ - нерелятивистские состояния уравнения Дирака (столбцы их четырёх элементов); $\tilde{\chi}, \tilde{\psi}$ - столбцы из двух элементов; \hat{H}_{eff} - эффективный гамильтониан (гамильтониан Паули).

Рассмотрим свободный гамильтониан Дирака (при отсутствии полей), для него:

$$\langle \chi | (\widehat{\alpha} c \widehat{p} + \beta m c^2) |\psi \rangle = \langle \chi | \int d\bar{q} (\widehat{\alpha} c \widehat{p} + \beta m c^2) \cdot (c_1(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}1+} \rangle + c_2(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}2+} \rangle) = \\ = \langle \chi | \int d\bar{q} W_q \cdot (c_1(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}1+} \rangle + c_2(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}2+} \rangle) \quad (22.16)$$

Разложим W_q по степеням $\frac{q}{mc}$ (можем, поскольку считаем, что $q \ll mc$):

$$W_q = \sqrt{m^2 c^4 + q^2 c^2} = mc^2 + \frac{q^2}{2m} - \cancel{\frac{1}{8} \frac{q^4}{m^2 c^2}}, \quad (22.17)$$

где последний член зачёркнут, так как превышает точность (ввиду порядка малости). Тогда, учитывая (22.17), можем записать (22.16) в виде:

$$\langle \chi | (\widehat{\alpha} c \widehat{p} + \beta m c^2) |\psi \rangle = \langle \chi | \int d\bar{q} \left(mc^2 + \frac{q^2}{2m} \right) (c_1(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}1+} \rangle + c_2(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}2+} \rangle) = \\ = \langle \chi | \int d\bar{q} \left(mc^2 + \frac{\widehat{\bar{p}}^2}{2m} \right) (c_1(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}1+} \rangle + c_2(\bar{q}) |\psi_{\bar{q}2+} \rangle) = \\ = \left\langle \chi \left| mc^2 + \frac{\widehat{\bar{p}}^2}{2m} \right| \right\rangle = \left\langle \tilde{\chi} \left| mc^2 + \frac{\widehat{\bar{p}}^2}{2m} \right| \tilde{\psi} \right\rangle \quad (22.18)$$

Для электростатического потенциала слагаемое в нерелятивистском пределе три-виально:

$$e\varphi(\bar{x}) \rightarrow e\varphi(\bar{x}) \quad (22.19)$$

Рассмотрим слагаемое для магнитного поля:

$$\widehat{\alpha} c \left(-\frac{e \widehat{\bar{A}}}{c} \right) = -e \widehat{\alpha} \widehat{\bar{A}} = -e \begin{pmatrix} 0 & \widehat{\bar{\sigma}} \widehat{\bar{A}} \\ \widehat{\bar{\sigma}} \widehat{\bar{A}} & 0 \end{pmatrix} \quad (22.20)$$

Сосчитаем соответствующий матричный элемент:

$$(\langle \tilde{\chi} |, 0) \cdot \begin{pmatrix} 0 & \widehat{\bar{\sigma}} \widehat{\bar{A}} \\ \widehat{\bar{\sigma}} \widehat{\bar{A}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} |\tilde{\chi}\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \equiv 0, \quad (22.21)$$

то есть, в нулевом порядке магнитного поля нет. Действительно, взаимодействие заряда с магнитным полем:

$$-\frac{e}{mc} \widehat{\bar{p}} \widehat{\bar{A}} \quad (22.22)$$

происходит в первом порядке ($1/c^1$).

В первом порядке:

$$|\psi\rangle = \int d\bar{q} \left[c_1(\bar{q}) \cdot \begin{pmatrix} 1 |\xi_1\rangle \\ \frac{q}{2mc} |\xi_1\rangle \end{pmatrix} + c_2(\bar{q}) \begin{pmatrix} 1 |\xi_2\rangle \\ -\frac{q}{2mc} |\xi_2\rangle \end{pmatrix} \right] \cdot \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \bar{q} \bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (22.23)$$

знаки в нижней части можно унифицировать, учитывая, что:

$$\hat{\bar{q}} |\xi_1\rangle = q |\xi_1\rangle \quad (22.24)$$

$$\hat{\bar{q}} |\xi_2\rangle = -q |\xi_2\rangle \quad (22.25)$$

если ещё учесть, что в конце (22.23) стоит плоская волна, то можно заменить вектор \bar{q} на оператор \hat{p} , тогда получим:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \cdot |\tilde{\psi}\rangle \\ \frac{\hat{\sigma}\hat{p}}{2mc} |\tilde{\psi}\rangle \end{pmatrix} \quad (22.26)$$

Вычислим матричный элемент для векторного потенциала:

$$\begin{aligned} \langle \chi | -e\hat{\alpha} \hat{A} | \psi \rangle &= \left(\langle \tilde{\chi} |, \langle \tilde{\chi} | \frac{\hat{\sigma}\hat{p}}{2mc} \right) \cdot \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \hat{A} \\ \hat{\sigma} \hat{A} & 0 \end{pmatrix} \cdot (-e) \cdot \begin{pmatrix} |\tilde{\psi}\rangle \\ \frac{\hat{\sigma}\hat{p}}{2mc} |\tilde{\psi}\rangle \end{pmatrix} = \\ &= \langle \tilde{\chi} | (\hat{\sigma} \hat{A})(\hat{\sigma} \hat{p}) + (\hat{\sigma} \hat{p})(\hat{\sigma} \hat{A}) |\tilde{\psi}\rangle \cdot \left(-\frac{e}{2mc} \right) \end{aligned} \quad (22.27)$$

Вспомним, что

$$(\hat{\sigma} \bar{a})(\hat{\sigma} \bar{b}) = \bar{a} \bar{b} + i [\bar{a} \times \bar{b}] \cdot \hat{\sigma} \quad (22.28)$$

Тогда получаем

$$\hat{p} \bar{A} + i [\hat{p} \times \bar{A}] \cdot \hat{\sigma} + \bar{A} \hat{p} + i [\bar{A} \times \hat{p}] \cdot \hat{\sigma}, \quad (22.29)$$

и тогда

$$\hat{p} \bar{A} - \bar{A} \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \underbrace{\nabla}_{=0} \cdot \bar{A} = 0 \quad (22.30)$$

Окончательно, находим:

$$i [\hat{p} \times \bar{A}] \cdot \hat{\sigma} + i [\bar{A} \times \hat{p}] \hat{\sigma} = \hbar \operatorname{rot} \bar{A} \cdot \hat{\sigma} = \hbar \cdot \bar{H} \cdot \hat{\sigma} \quad (22.31)$$

Тогда для матричного элемента, имеем:

$$\begin{aligned} \langle \chi | -e\hat{\alpha} \bar{A} | \psi \rangle &= \left\langle \tilde{\chi} \left| -\frac{e}{2mc} \cdot 2\hat{p} \bar{A} - \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc} \cdot \bar{H}}_{\mu_0} \underbrace{\hat{\sigma}}_{2\hat{s}} \right| \tilde{\psi} \right\rangle = \\ &= \left\langle \tilde{\chi} \left| -\frac{e}{mc} \hat{p} \bar{A} - 2\mu_0 \hat{s} \bar{H} \right| \tilde{\psi} \right\rangle \end{aligned} \quad (22.32)$$

Где в центре стоит эффективный гамильтониан - гамильтониан Паули.

Если дойти до порядка $1/c^2$ то появятся слагаемые:

$$-\frac{p^4}{8mm^2c^2}; \quad \frac{1}{8} \frac{\hbar^2}{m^2c^2} \Delta \varphi; \quad -\mu_0 \bar{s} \left[\frac{\bar{p}}{mc} \times \bar{E} \right], \quad (22.33)$$

где последнее слагаемое является ls - взаимодействием. ls - взаимодействие - это релятивистская поправка к уравнению Дирака.

Невозможность локализации частицы Дирака

Рассмотрим состояние:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \bar{q} \bar{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{q^2}{2q_0^2}} \cdot dq \quad (22.34)$$

Устремив в (22.34) $q_0 \rightarrow \infty$ получим Гауссов пик сколь угодно малой ширины. Попробуем локализовать это состояние хотя бы по одной оси:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q z}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{q^2}{2q_0^2}} dq \sim e^{-\frac{z^2}{2z_0^2}}, \quad (22.35)$$

где

$$z_0 \sim \frac{\hbar}{q_0} \quad (22.36)$$

Однако, состояние (22.36) представляет собой смесь электронов и позитронов. Локализовать только, например, электроны нельзя.

Например, возьмём электрон с положительной спиральностью:

$$|\xi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |\xi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (22.37)$$

Попробуем сконструировать состояние электрона, который по оси z находится в начале координат. Введём обозначения:

$$\sqrt{\frac{W_q + mc^2}{2W_q}} \equiv a_q \quad (22.38)$$

$$\sqrt{\frac{W_q - mc^2}{2W_q}} \equiv b_q \quad (22.39)$$

Зависимости величин (22.38), (22.39) представлены на рис. 22.1.

Попробуем локализовать хотя бы верхнюю компоненту частицы Дирака:

$$\int dq \left(\frac{a_q}{a_q + b_q - a_q} \right) \cdot \frac{1}{a_q} \cdot e^{-\frac{q^2}{2q_0^2}} \cdot e^{iqz} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\frac{z^2}{2z_0^2}} + \int dq \left(\frac{b_q}{a_q} - 1 \right) e^{-\frac{q^2}{2q_0^2}} e^{iqz} \quad (22.40)$$

Рассмотрим теперь величину $\frac{b_q}{a_q} - 1$ (См. рис. 22.2).

Если $q_0 \ll mc$, то размер пакета в импульсном представлении $\sim q_0$, а в координатном $\sim z_0 \sim \frac{\hbar}{q_0}$.

Однако, если $q_0 > mc$, то ширину пакета в импульсном представлении регулирует переходная область (вертикальная чёрная прямая на рис. 22.2), после которой происходит зануление. Тогда размер пакета в импульсном представлении $\sim mc$, а характерный размер в координатном пространстве $\sim z_0 \sim \frac{\hbar}{mc} \equiv \Lambda_C$. (Комптоновская длина волны электрона).

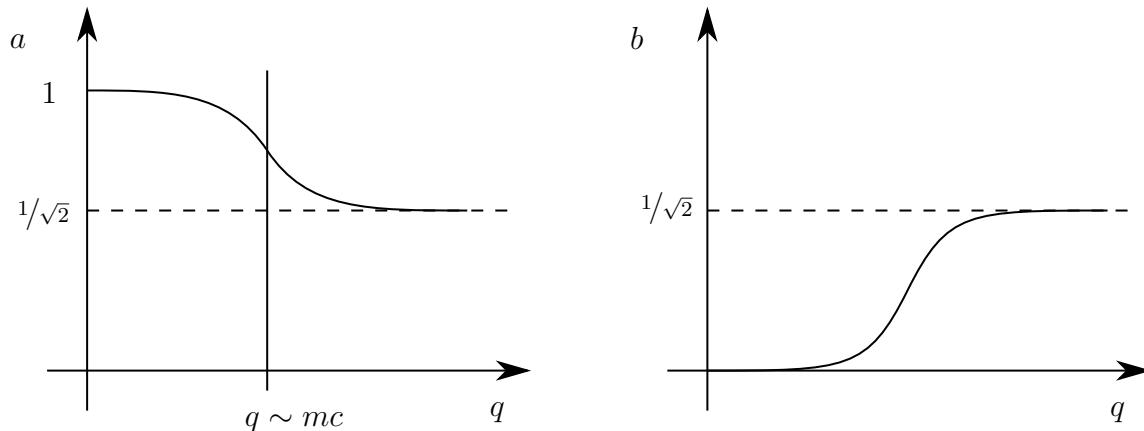


Рис. 22.1. Зависимости a_q и b_q от q

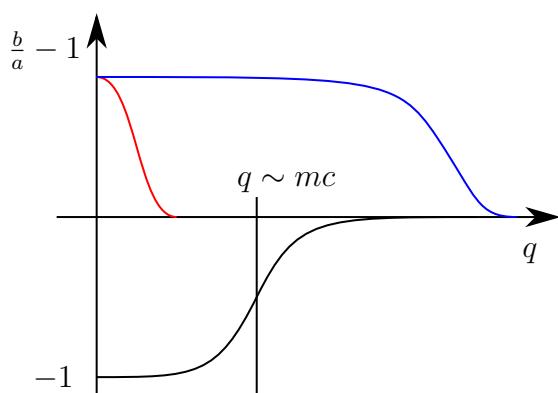


Рис. 22.2. Зависимость величины $b_q/a_q - 1$ от q (чёрная кривая), ширина Гауссова пакета при $q_0 \ll mc$ (красная кривая); ширина Гауссова пакета при $q_0 > mc$ (синяя кривая)



ФИЗИЧЕСКИЙ
ФАКУЛЬТЕТ
МГУ ИМЕНИ
М.В. ЛОМОНОСОВА



teach-in
ЛЕКЦИИ УЧЕНЫХ МГУ