

А. Б. МИГДАЛ, В. П. КРАЙНОВ

# ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»  
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
МОСКВА 1966

## АННОТАЦИЯ

В существующей литературе приближенные методы квантовомеханических расчетов либо вовсе не излагаются, либо даются с формально-математической точки зрения. В этой книге приближенные методы излагаются с помощью наглядных физических соображений. По ходу изложения приводится большое количество работ из различных областей теоретической физики. В конце каждого раздела даются задачи.

В основу книги положен курс лекций, который на протяжении последних десяти лет один из авторов читал в Московском инженерно-физическом институте.

Книга предназначена для студентов старших курсов и аспирантов физических факультетов университетов и инженерно-физических вузов.

*Аркадий Бейнусович Мигдал, Владимир Павлович Крайнов*

Приближенные методы квантовой механики

М., 1966 г., 152 стр. с илл.

Редактор *В. И. Рывнин*

Техн. редактор *Л. Ю. Плакш*

Корректор *М. Л. Липелис*

---

Сдано в набор 11/VIII 1966 г. Подписано к печати 18/X 1966 г.  
Бумага 84×108<sup>1/2</sup>/<sub>32</sub>. Физ. печ. л. 4,75. Условн. печ. л. 7,98.  
Уч.-изд. л. 7,33. Тираж 25 000 экз. Т-12772. Цена 26 коп. Заказ № 710.

---

Издательство «Наука»  
Главная редакция физико-математической литературы  
Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

---

Первая Образцовая типография имени А. А. Жданова  
Главполиграфпрома Комитета по печати при Совете Министров СССР  
Москва, Ж-54, Валовая, 28.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	5
Глава I. Размерные и модельные оценки . . . . .	7
1. Оценки математических выражений . . . . .	7
Оценка производной $F'(x)$ (8). Оценки интегралов (9). Метод перевала. Асимптотическое выражение для гамма-функции (12). Свойства интегралов от осциллирующих функций. Оценки далеких членов ряда Фурье (15). Оценки решений дифференциальных уравнений (19).	
2. Аналитические свойства физических величин . . . . .	23
Зависимость момента инерции ядра от деформации (23). Зависимость частоты звука от волнового вектора (24). Аналитические свойства волновой функции (25). Амплитуда рассеяния при малых энергиях (26). Аналитические свойства диэлектрической постоянной (28). Аналитические свойства амплитуды рассеяния (31).	
3. Оценки в атомной механике . . . . .	32
Оценки скоростей и размеров орбит внутренних электронов атома (32). Стационарные состояния (33). Распределение электрического заряда в атоме (36). Формула Резерфорда (38). Неприменимость классической механики при больших прицельных параметрах (39). Оценка сечения рассеяния для потенциалов, спадающих с расстоянием быстрее, чем кулоновский (41). Резонансные эффекты при рассеянии (42). Взаимодействие между атомами (43). Ионизация атомов (44). Многократное рассеяние (45).	
4. Оценки в квантовой электродинамике . . . . .	47
Нулевые колебания электромагнитного поля (47). Фотоэффект (50). Времена жизни возбужденных состояний атома (54). Тормозное излучение (56). Образование пар (59). Лэмбовское смещение (61). Расходимость рядов в квантовой электродинамике (63).	

<b>Глава 2. Различные случаи теории возмущений . . . . .</b>	<b>65</b>
1. Теория возмущений в непрерывном спектре. Рассеяние заряженных частиц на ядрах . . . . .	65
Рассеяние заряженных частиц на атомном ядре (71).	
2. Возмущение граничных условий. Энергетические уровни деформированного ядра . . . . .	73
Энергетические уровни деформированного ядра (74).	
3. Внезапные возмущения. Ионизация при $\beta$ -распаде и ударе об ядро . . . . .	76
Ионизация атомов при $\beta$ -распаде (78). Ионизация атомов при ядерных реакциях (81). Передача энергии при вылете кванта из ядра молекулы (эффект Мёссбауэра) (83). Задачи (85).	
4. Адиабатические возмущения . . . . .	86
Захват электрона протоном (перезарядка) (89).	
5. Быстрая и медленная подсистемы . . . . .	94
Колебательные уровни энергии молекулы (95). Возбуждение ядерных дипольных уровней быстрой частицей (98). Рассеяние протона на атоме водорода (перезарядка) (101). Рождение мягких квантов при рассеянии («инфракрасная катастрофа») (103).	
6. Теория возмущений в случае близких уровней . . . . .	110
Частица в периодическом потенциале (112). Штарк-эффект в случае близких уровней (113). Изменение времени жизни состояния $2s_{1/2}$ атома водорода во внешнем электрическом поле (114).	
<b>Глава 3. Квазиклассическое приближение . . . . .</b>	<b>117</b>
1. Одномерная задача . . . . .	117
Асимптотические ряды (118). Сшивание квазиклассических функций (120). Условие квантования (125). Точность квазиклассического приближения (126). Нормировка квазиклассических функций (127). Принцип соответствия (128). Средняя кинетическая энергия (128). Связь квазиклассических матричных элементов с компонентами Фурье классического движения (129). Критерий применимости теории возмущений для расчета не слишком малых величин (130). Надбарьерное отражение (132).	
2. Трехмерная задача . . . . .	135
Центрально-симметричное поле (135). Уровни энергии в кулоновском поле (136). Квазиклассическое представление сферических функций (138). Распределение Томаса—Ферми в атоме (140). Оценки ядерных матричных элементов (145). Нецентральный потенциал (148). Квазиклассическая задача рассеяния (149). Сечение рассеяния протона на атоме водорода (151).	

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Главная задача этой книги — научить начинающего физика качественным методам теоретической физики. Под качественными методами мы понимаем прежде всего порядковые оценки физических величин, рассмотрение явлений с помощью упрощающих моделей, использование аналитических свойств изучаемых величин и т. д. Кроме того, сюда же отнесены приближенные методы решения уравнений в тех случаях, когда может быть использована малость какого-либо из параметров, характеризующих явление (малость возмущения, адиабатичность или внезапность возмущения и т. д.). Эти методы применяются к задачам квантовой механики и квантовой теории излучения.

Мы старались обратить внимание на качественную, физически наглядную сторону расчетов. Математические детали по возможности опущены.

В каждом разделе после общей теории рассматриваются ее применения в различных явлениях. Кроме того, даются задачи, решение которых предоставляется читателю.

Книга возникла из курса лекций, которые читались одним из авторов в течение нескольких лет в Московском инженерно-физическом институте. Это в большой степени определило выбор материала книги и характер изложения.

Мы стремились к простоте — у читателя предполагается только знание основ квантовой механики и математическое образование в объеме первых трех курсов инженерных вузов. Вместе с тем, мы старались не повторять того, что уже хорошо изложено. Многие вопросы, рассмотренные в книге, вообще не излагались в учебной литературе.

Книга состоит из трех разделов. В первом разделе ставится задача научить читателя размерным и модельным

оценкам. Этот раздел начинается с оценок математических выражений. Даются оценки производных и интегралов, приводятся методы качественного решения дифференциальных уравнений, рассматриваются следствия, вытекающие из аналитических свойств физических величин. Далее с помощью модельных и размерных оценок получают основные результаты квантовой механики и квантовой электродинамики (уровни энергии, сечения рассеяния, времена жизни атомных состояний, лэмбовский сдвиг).

Во втором разделе изучаются различные виды теории возмущений (адиабатическая теория возмущений, возмущение граничных условий, внезапные возмущения и т. д.). В этом разделе задачи квантовой механики решаются количественно, а не только по порядку величины, как в первом разделе (ионизация атомов при  $\beta$ -распаде и ядерных реакциях, перезарядка атомов, возбуждение ядер, эффект Мёссбауэра, «инфракрасная катастрофа»).

Наконец, последний раздел книги содержит подробное изложение квазиклассического приближения как для одномерных, так и для трехмерных задач квантовой механики (граничные условия в одномерном и трехмерном случаях, метод Томаса—Ферми, квазиклассическое представление сферических функций, рассеяние на нецентральной потенциале и т. д.)

Авторы благодарят В. Я. Арсенина и И. И. Гольдмана за просмотр рукописи и интересные замечания.

Мы рассматриваем эту книгу как попытку обучения качественным приемам теоретической физики и будем благодарны за любые исправления и замечания.

*А. Мигдал, В. Крайнов*

Июнь 1966 г.

## РАЗМЕРНЫЕ И МОДЕЛЬНЫЕ ОЦЕНКИ

Ни одна задача в физике не решается точно. Всегда приходится пренебрегать влиянием каких-либо воздействий, которые не существенны для изучаемого явления. При этом нужно уметь оценивать отбрасываемые величины. Кроме того, следует до получения количественного результата исследовать изучаемое явление качественно, т. е. оценить порядок изучаемой величины и по возможности найти характер решения.

Цель этой главы — научить читателя получать приближенные решения из размерных оценок и с помощью упрощенной модели изучаемого явления.

В некоторых случаях размерные оценки позволяют получить и количественные соотношения. Докажем, например, теорему Пифагора из размерных соображений. Из размерности вытекает, что площадь треугольника (рис. 1) можно записать как квадрат гипотенузы  $c^2$ , умноженный на произвольную функцию угла  $f(\alpha)$ . То же самое относится к площадям двух подобных треугольников  $ABD$  и  $BCD$ , для которых роль гипотенузы играют катеты исходного треугольника. Поэтому

$$c^2 f(\alpha) = a^2 f(\alpha) + b^2 f(\alpha).$$

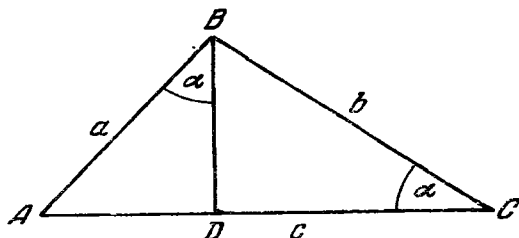


Рис. 1.

### 1. ОЦЕНКИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ВЫРАЖЕНИЙ

Прежде чем производить оценки физических величин, посмотрим, как делать более простые оценки, а именно — оценки математических выражений. Принцип подобных

оценок состоит в определении области переменных, вносящей главный вклад в результат, и в выделении быстро и медленно меняющихся в этой области частей математического выражения.

### Оценка производной $F'(x)$

Если  $l$  — характерная длина интервала, на котором существенно изменяется функция  $F(x)$ , то внутри этого интервала  $F'(x) \sim F(x)/l$ .

Например, если  $F(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{l^2}\right)$ , то  $F'(x) = -\frac{2x}{l^2} \exp\left(-\frac{x^2}{l^2}\right)$  и, следовательно,  $F'(l) \sim F(l)/l$ .

Однако для  $x$ , существенно отличных от  $x \sim l$ , такая оценка не годится.

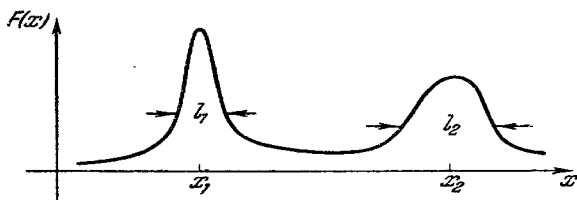


Рис. 2.

Для степенной функции  $F(x) = x^n$  область существенного изменения определяется самой переменной  $x$ . Действительно,

$$F'(x) = nx^{n-1} \sim F(x)/x.$$

В некоторых случаях функция  $F(x)$  характеризуется несколькими параметрами. Тогда в каждой области переменной  $x$  производная  $F'(x) \sim \frac{F(x)}{l}$ , где  $l$  — длина, на которой  $F(x)$  существенно меняется в этой области. Пусть, например,  $F(x)$  имеет вид, изображенный на рис. 2. Тогда  $F'(x \sim x_1) \sim \frac{F(x_1)}{l_1}$ , а  $F'(x \sim x_2) \sim \frac{F(x_2)}{l_2}$ .

Вообще, в тех случаях, когда  $F(x)$  можно хотя бы примерно нарисовать, ее производную лучше всего оценивать из графика.



## Оценки интегралов

$$1. I(x) = \int_0^x e^{t^2} \frac{dt}{\sqrt{x^2 - t^2}}.$$

Если  $x \ll 1$ , то в подынтегральном выражении экспонента  $e^{t^2} \approx 1$ . Следовательно,  $I(x) \approx \int_0^x \frac{dt}{\sqrt{x^2 - t^2}} = \int_0^1 \frac{dz}{\sqrt{1 - z^2}}$ . Так как в этом интеграле нет никаких параметров, то  $I(x) \sim 1$ . Вычисляя, находим,  $I(x) \approx \pi/2$ . Если  $x \gg 1$ , то из-за экспоненциального роста множителя  $e^{t^2}$  главный вклад в интеграл внесет область около точки  $t = x$ .

Если обозначить  $\xi = x - t$ , то

$$I(x) = \int_0^x e^{x^2 - 2\xi x + \xi^2} \frac{d\xi}{\sqrt{2\xi x - \xi^2}}.$$

Область  $\xi$ , существенная в подынтегральном выражении, сосредоточена около нижнего предела и имеет ширину порядка  $1/2x$ . В этой области  $\xi^2 \sim 1/4x^2 \ll 1$ , следовательно,  $e^{\xi^2} \approx 1$  и

$$I(x) \approx e^{x^2} \int_0^x e^{-2\xi x} \frac{d\xi}{\sqrt{2\xi x}} \approx \frac{e^{x^2}}{2x} \int_0^\infty e^{-z} \frac{dz}{\sqrt{z}} \sim \frac{e^{x^2}}{2x}.$$

При  $x \sim 1$  оба выражения для  $I(x)$ , как это должно быть, примерно совпадают и порядка единицы. Таким образом, указанные оценки хорошо описывают  $I(x)$  во всей области изменения  $x$ .

$$2. I(\alpha, \beta) = \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} \sin^2 \beta x dx.$$

Перепишем этот интеграл в виде

$$I(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \int_0^\infty e^{-z^2} \sin^2 \left( \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z \right) dz.$$

При  $z > 1$  подынтегральная функция быстро убывает, поэтому существенная область интегрирования  $0 < z < 1$ . Если  $\beta \gg \sqrt{\alpha}$ , то  $\sin \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z$  много раз осциллирует в существенной области значений  $z$ . Следовательно,  $\sin^2 \left( \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z \right)$  можно заменить на  $1/2$  и интеграл  $I(\alpha, \beta)$  приближенно равен

$$I(\alpha, \beta) \approx \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} \int_0^{\infty} e^{-z^2} dz = \frac{C_1}{\sqrt{\alpha}},$$

где  $C_1$  — числовой множитель, равный  $\sqrt{\pi}/4$ .

Если  $\beta \ll \sqrt{\alpha}$ , то в существенной области значений  $z$   $\sin \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z \approx \frac{\beta}{\sqrt{\alpha}} z$ . Следовательно,

$$I(\alpha, \beta) \approx \frac{\beta^2}{\alpha\sqrt{\alpha}} \int_0^{\infty} e^{-z^2} z^2 dz = C_2 \frac{\beta^2}{\alpha\sqrt{\alpha}},$$

где  $C_2$  — числовой множитель, равный  $\sqrt{\pi}/4$ .

При  $\beta = \sqrt{\alpha}$  оба выражения для  $I(\alpha, \beta)$  совпадают и равны  $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ .

Заметим, что точное значение оцениваемого интеграла равно

$$I(\alpha, \beta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \left( 1 - e^{-\frac{\beta^2}{\alpha}} \right).$$

Легко видеть, что из него получаются оба предельных случая  $\beta \gg \sqrt{\alpha}$  и  $\beta \ll \sqrt{\alpha}$ , приведенные выше. При  $\beta = \sqrt{\alpha}$   $I(\alpha, \beta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \left( 1 - \frac{1}{e} \right)$ , т. е. того же порядка, что и приведенные оценки.

Рассмотрим, наконец, интеграл

$$3. I(\alpha, a) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha x}}{x+a} dx, \quad \alpha > 0.$$

Заменяем переменную интегрирования:  $x = az$ . Тогда  $I(\alpha, a)$  принимает вид

$$I = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha az} dz}{z+1}.$$

Область, где подынтегральная функция существенно отлична от нуля,  $z \leq 1/\alpha a$ .

Пусть  $\alpha a \gg 1$ . Тогда  $z \ll 1$  в существенной области. Следовательно,

$$I \underset{\alpha a \gg 1}{\approx} \int_0^{\infty} e^{-\alpha az} dz = \frac{1}{\alpha a}. \quad (1.1)$$

Если  $\alpha a \ll 1$ , то в существенной области  $z \gg 1$ . Следовательно, можно заменить  $z+1 \approx z$  и  $e^{-\alpha az} \approx 1$ . Поэтому

$$I \underset{\alpha a \ll 1}{\approx} \int_1^{1/\alpha a} \frac{dz}{z} = \ln \frac{1}{\alpha a}. \quad (1.2)$$

Рассматриваемый интеграл выражается через интегральную показательную функцию  $Ei(x)$  \*)

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha x}}{x+a} dx = -e^{\alpha a} Ei(-\alpha a).$$

Если  $\alpha a \gg 1$ , то  $Ei(-\alpha a) \approx \frac{e^{-\alpha a}}{-\alpha a}$ , и мы получаем формулу (1.1). Если  $\alpha a \ll 1$ , то  $Ei(-\alpha a) \approx \ln \frac{1}{\alpha a}$ , что совпадает с (1.2).

Задача. Оценить интеграл  $I = \int_0^{\infty} \sin \alpha x^2 \cdot e^{-\beta x} dx$ .

Ответ.  $I \sim \frac{1}{\alpha \gg \beta^2 \sqrt{\alpha}}$ ,  $I \sim \frac{\alpha}{\alpha \ll \beta^2 \beta^3}$ .

\*) И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, Таблицы интегралов, сумм и произведений, Физматгиз, 1962.

### Метод перевала. Асимптотическое выражение для гамма-функции

Получим асимптотическое выражение при больших  $x$  для гамма-функции

$$x! \equiv \Gamma(x+1) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^x dt.$$

Запишем это выражение в виде  $\int_0^{\infty} e^{-t+x \ln t} dt$  и вычис-

лим его по способу, который называется методом перевала.

Этот метод состоит в следующем. Рассмотрим интеграл

$I(x) = \int_0^{\infty} g(t) e^{f(x,t)} dt$ , где  $e^{f(x,t)}$  — функция, которая для больших  $x$  имеет резкий максимум при  $t = t_0(x)$ . Пусть вблизи  $t_0(x)$  функция  $g(t)$  медленно меняется.

Тогда в окрестности максимума функцию  $ge^f$  можно заменить более простой функцией. Для этого разложим  $f(x,t)$  в ряд Тейлора в окрестности ее максимума  $t_0$ :

$$f(x,t) = f(x,t_0) + \frac{1}{2}(t-t_0)^2 f''(x,t_0) + \dots$$

Предположим, что  $|f''(x,t_0)| \gg 1/t_0^2$ . Тогда

$$\begin{aligned} I(x) &\approx g(t_0) \int_{-\infty}^{\infty} e^{f(x,t_0) - \frac{1}{2}(t-t_0)^2 |f''(x,t_0)|} dt = \\ &= \frac{g(t_0) e^{f(x,t_0)}}{\sqrt{\frac{1}{2} |f''(x,t_0)|}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\frac{2\pi}{|f''(x,t_0)|}} g(t_0) e^{f(x,t_0)}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Пределы интегрирования здесь заменены на  $[-\infty, \infty]$ , так как подынтегральное выражение экспоненциально затухает в области

$$\delta t \sim 1/\sqrt{|f''(t_0)|} \ll t_0.$$

Если заменить в (1.3)  $t - t_0 = i\xi$ , то подынтегральное выражение превратится в растущую экспоненту. Иными словами, в комплексной плоскости переменной  $t$  точка  $t_0$  является седловой (рис. 3). Направление интегрирования совпадает с направлением наискорейшего спуска с перевала. Отсюда понятно название метода перевала.

Мы рассмотрели частный случай, когда направление перевала совпадает с вещественной осью. Можно рассмотреть и более общий случай, когда направление перевала составляет произвольный угол с вещественной осью.

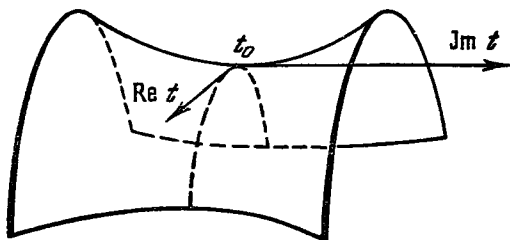


Рис. 3.

Итак, вычислим  $\Gamma(x+1)$  методом перевала. Обозначим  $f(t) = -t + x \ln t$ . Тогда из равенства нулю  $f'(t)$  можно найти точку перевала  $t_0$ :

$$f'(t_0) = -1 + \frac{x}{t_0} = 0,$$

откуда  $t_0 = x$ . Далее,  $f''(t_0) = -\frac{x}{t_0^2} = -\frac{1}{x}$ . Итак, вблизи точки перевала  $t_0 = x$

$$f(t) \approx f(t_0) + \frac{1}{2}(t - t_0)^2 \frac{-1}{x}.$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \Gamma(x+1) &\approx e^{f(t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2x}(t-t_0)^2} dt = \\ &= e^{-x+x \ln x} \sqrt{2x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{2\pi x} x^x e^{-x}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Эта асимптотическая формула называется формулой Стирлинга. Для оценки ее точности напишем следующие члены разложения  $f(t)$  вблизи точки перевала. Так как  $f'''(t_0) = \frac{2x}{t_0^3} = \frac{2}{x^2}$ , то в показатель экспоненты добавляется

кубический член  $\frac{2}{3! x^2} (t - t_0)^3$ . Учитывая его малость, разложим в ряд экспоненту

$$e^{\frac{2}{3! x^2} (t-t_0)^3} \approx 1 + \frac{1}{3x^2} (t-t_0)^3.$$

Интеграл от этой поправки обратится в нуль из-за нечетности подинтегральной функции. Поэтому, чтобы найти поправку, нужно разлагать  $f(t)$  вблизи  $t_0$  с точностью до  $(t-t_0)^4$ . Так как

$$f^{(IV)}(t_0) = -\frac{6x}{t_0^4} = -\frac{6}{x^3},$$

то

$$e^{\frac{2}{3! x^2} (t-t_0)^3} - \frac{6}{4! x^3} (t-t_0)^4 \approx 1 + \frac{(t-t_0)^3}{3x^2} - \frac{(t-t_0)^4}{4x^3} + \frac{(t-t_0)^6}{18x^4}.$$

Следовательно, поправка к  $\Gamma(x+1)$  имеет оценку:

$$\begin{aligned} e^{f(t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2x}(t-t_0)^2} \left[ -\frac{(t-t_0)^4}{4x^3} + \frac{(t-t_0)^6}{18x^4} \right] dt = \\ = e^{-x+x \ln x} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \left[ -\frac{z^4 \cdot 4x^2}{4x^3} + \frac{z^6 \cdot 8x^3}{18x^4} \right] \sqrt{2x} dz = \frac{\sqrt{2\pi} x^x}{12 \sqrt{x}} e^{-x}. \end{aligned}$$

Итак,

$$\Gamma(x+1) \approx \sqrt{2\pi x} e^{-x} x^x \left( 1 + \frac{1}{12x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right) \right).$$

Интересно, что формула Стирлинга с большой точностью годится и для небольших значений  $x$ . Например, даже для  $x=1$  получаем по этой формуле

$$\sqrt{2\pi} \frac{1}{e} \left( 1 + \frac{1}{12} \right) = 0,995 \approx 1! = 1,$$

при  $x=2$

$$\sqrt{4\pi} \frac{4}{e^2} \left( 1 + \frac{1}{24} \right) = 1,9994 \approx 2! = 2.$$

**Задача.** Вычислить интеграл  $\int_0^{\infty} z^{-az} dz$  методом перевала.

Ответ.  $\sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{\alpha}{e} - \frac{1}{2}}$ .

### Свойства интегралов от осциллирующих функций. Оценки далеких членов ряда Фурье

Рассмотрим несколько примеров, поясняющих свойства интегралов от осциллирующих функций.

$$1. \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega t} dt}{\sqrt{a^2 + v^2 t^2}}, \quad \omega \rightarrow \infty.$$

Особые точки подынтегрального выражения находятся на мнимой оси:  $t = \pm i \frac{a}{v}$ . Вычислим этот интеграл, смещая контур интегрирования в верхнюю полуплоскость (см. рис. 4).

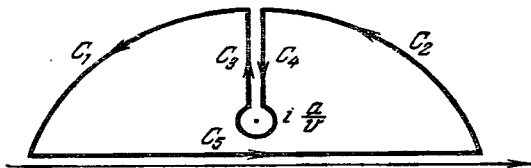


Рис. 4.

Интегралы по  $C_1$  и  $C_2$  исчезают при смещении контура в бесконечность. Поэтому рассматриваемый интеграл равен интегралу по контуру  $C_3 + C_4 + C_5$  вокруг точки ветвления  $t = i \frac{a}{v}$ . Знаменатель подынтегрального выражения  $\sqrt{a^2 + v^2 t^2}$  меняет знак при обходе точки ветвления. Поэтому интегралы по  $C_3$  и  $C_4$  равны (а не равны с противоположным знаком, как это было бы в случае обхода простого полюса). Интеграл по контуру  $C_5$  стремится к нулю. В этом легко убедиться, заменяя  $\frac{v}{a} t = i + re^{i\varphi}$ , причем  $r \rightarrow 0$ . Тогда

$$\int_{C_5} \sim \int_0^{2\pi} \frac{re^{i\varphi} d\varphi}{\sqrt{re^{i\varphi}}} \sim \sqrt{r} \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0.$$

Вводя переменную интегрирования  $x = \frac{v}{a} t$ , имеем:

$$I = \frac{a}{av} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \frac{\omega ax}{v}} \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}} \underset{x=i(1+\eta)}{=} \frac{2e^{-\frac{\omega a}{v}}}{v} \int_0^{\infty} e^{-\frac{\omega a \eta}{v}} \frac{d\eta}{\sqrt{2\eta}} = \frac{\sqrt{2\pi}}{v} e^{-\frac{\omega a}{v}} \sqrt{\frac{v}{\omega a}}.$$

При больших  $\omega$  интеграл  $I$  экспоненциально мал.

$$2. \quad I = \int_{-1}^1 f(x) e^{ikrx} dx$$

при  $r \rightarrow \infty$ . Этот интеграл возникает при вычислении амплитуды рассеяния (см. 2.1). Пределы интегрирования здесь конечны. Интегрируя по частям, получим:

$$I = f(x) \frac{e^{ikrx}}{ikr} \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 f'(x) e^{ikrx} dx = \\ = \frac{f(1) e^{ikr} - f(-1) e^{-ikr}}{ikr} + O\left(\frac{1}{k^2 r^2}\right).$$

Итак, в случае конечных пределов далекие фурье-компоненты малы степенным образом (вместо экспоненциальной малости в случае бесконечных пределов).

3. Эти результаты можно обобщить: далекие фурье-компоненты функций, не имеющих особенностей на вещественной оси, экспоненциально малы. Если  $x_1$  — характерная длина  $f(x)$  (это означает, что расстояние от вещественной оси до особой точки — порядка  $x_1$ ), то

$$f_{\omega} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx \sim e^{-\omega x_1}, \\ \omega x_1 \gg 1$$

Оценим предэкспоненциальный множитель для фурье-компоненты  $f_{\omega}$ . Если  $f(x)$  имеет полюс в комплексной плоскости  $\omega$ , то

$$f_{\omega} \sim f(x_1) x_1 e^{-\omega x_1}.$$

Действительно, вычет  $C_1$  функции  $f$  в точке полюса, как видно из размерности, имеет порядок  $C_1 \sim f(x_1) x_1$ . Если  $f(x)$  имеет точку ветвления корневого типа, то, как мы видели на первом примере (стр. 15)

$$f_{\omega} \sim \frac{f(x_1) x_1}{\sqrt{\omega x_1}} e^{-\omega x_1}.$$

В случае конечных пределов

$$f_{\omega} = \int_{a_1}^{a_2} f(x) e^{i\omega x} dx \sim \frac{f(a_1)}{\omega}.$$



То же самое относится к интегралам в бесконечных пределах в случае, когда  $f(x)$  имеет скачки на вещественной оси. Действительно, интеграл можно разбить на области от  $-\infty$  до места скачка и от места скачка до  $\infty$ . Если вычислять затем каждый из этих интегралов, то, как и в только что приведенном примере, возникнет степенная малость. В этом случае

$$f_{\omega} \underset{\omega \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Delta f}{\omega},$$

где  $\Delta f$  — величина скачка.

Легко видеть, что если скачок имеет  $n$ -я производная функции  $f(x)$ , то

$$f_{\omega} \underset{\omega \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Delta f^{(n)}}{\omega^{n+1}},$$

где  $\Delta f^{(n)}$  — величина скачка функции  $f^{(n)}(x)$ . Чтобы убедиться в этом, нужно проинтегрировать по частям  $n+1$  раз величину  $f_{\omega} = \int_{-\infty}^a f(x) e^{i\omega x} dx + \int_a^{\infty} f(x) e^{i\omega x} dx$ , где  $a$  — место скачка.

4. Для иллюстрации этих результатов рассмотрим пример, на котором будет видно, как в далеких компонентах

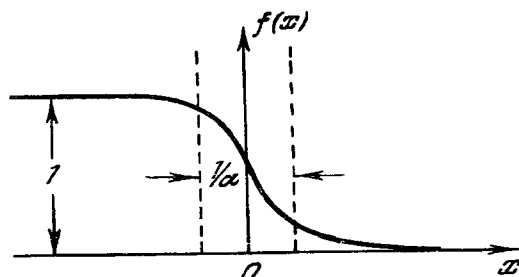


Рис. 5.

Фурье экспоненциальная малость превращается в степенную, когда особенность функции приближается к вещественной оси. Именно, рассмотрим интеграл

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega x}}{1 + e^{\alpha x}} dx, \quad \omega = \omega_0 - i\delta, \quad \delta \rightarrow +0, \quad \alpha > 0.$$

График функции  $f(x) = \frac{1}{1+e^{\alpha x}}$  имеет вид, изображенный на рис. 5. Если  $\alpha \rightarrow \infty$ , то эта функция стремится к прямоугольной ступеньке. Функция  $f(x)$  имеет простые полюсы в точках  $x = \frac{(2k+1)\pi i}{\alpha}$ , где  $k$  — целое число. Если  $\alpha \rightarrow \infty$ , то каждый полюс приближается к вещественной оси.

Вычислим интеграл, смещая контур интегрирования в верхнюю полуплоскость (рис. 6). Интеграл по  $C_1 + C_2$

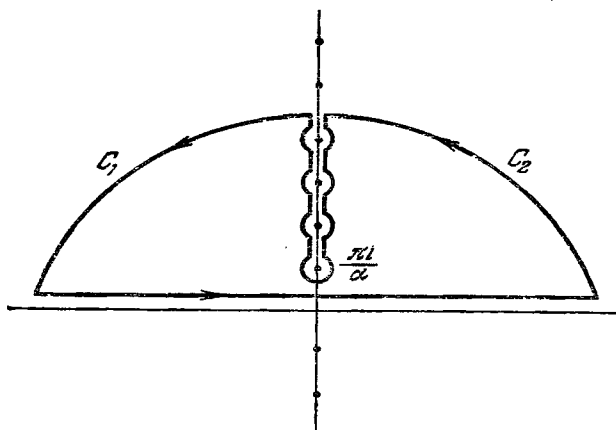


Рис. 6.

обращается в нуль при смещении контура в бесконечность. Итак, рассматриваемый интеграл сводится к сумме вычетов в полюсах верхней полуплоскости. Для нахождения вычета разложим  $e^{\alpha x}$  в ряд вблизи полюса  $x_k$ :

$$e^{\alpha x} \approx e^{\alpha x_k} + \alpha e^{\alpha x_k} (x - x_k) = -1 - \alpha (x - x_k).$$

Тогда

$$\begin{aligned} I &= - \sum_{k=0}^{\infty} \text{Res} \int e^{i\omega x} \frac{dx}{- \alpha (x - x_k)} = \frac{2\pi i}{\alpha} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\frac{\omega}{\alpha} (2k+1)\pi} = \\ &= \frac{2\pi i}{\alpha} e^{-\frac{\pi\omega}{\alpha}} \left[ 1 + e^{-2\frac{\pi\omega}{\alpha}} + e^{-4\frac{\pi\omega}{\alpha}} + e^{-6\frac{\pi\omega}{\alpha}} + \dots \right]. \end{aligned}$$

Ряд в квадратных скобках представляет собой геометрическую прогрессию и его сумма равна  $\frac{1}{1 - e^{-2\frac{\pi\omega}{\alpha}}}$ .

Следовательно,

$$I = \frac{2\pi i}{\alpha} \frac{e^{-\pi\omega/\alpha}}{1 - e^{-2\pi\omega/\alpha}} = \frac{\pi i}{\alpha \operatorname{sh} \frac{\pi\omega}{\alpha}}.$$

Если  $\omega/\alpha \gg 1$ , то рассматриваемый интеграл экспоненциально мал:

$$I \approx \frac{2\pi i}{\alpha} e^{-\pi\omega/\alpha}, \quad \omega/\alpha \gg 1$$

Это соответствует сделанному выше утверждению об экспоненциальной малости далеких фурье-компонент в случае, когда подынтегральная функция не имеет особенностей на вещественной оси.

Если  $\alpha \rightarrow \infty$ , то

$$I \approx \frac{i}{\omega}, \quad \omega/\alpha \ll 1$$

Итак, когда особенность переходит на вещественную ось, фурье-компонента становится малой степенным образом.

**Задача** Оценить далекую фурье-компоненту функции  $f(x) = xe^{-|x|}$ .

Ответ.  $f_{\omega} \underset{\omega \rightarrow \infty}{\approx} \frac{2}{\omega^3}$ .

## Оценки решений дифференциальных уравнений

Приведем несколько случаев качественного решения дифференциальных уравнений.

1. Квазиклассическое приближение (этот метод будет подробно рассмотрен ниже, в 3.1).

При рассмотрении многих задач теоретической физики требуется решить дифференциальное уравнение вида

$$\varphi'' + k^2(x)\varphi = 0. \quad (1.5)$$

Характер решения уравнения (1.5) существенно зависит от знака  $k^2$ . Действительно, пусть  $k^2$  — постоянная положительная величина. Тогда решение имеет осциллирующий характер:  $\varphi = e^{\pm ikx}$ . Если  $k^2 < 0$ , то решение экспоненциально растет или затухает:  $\varphi = e^{\pm |k|x}$ . Решение уравнения (1.5) имеет такой же характер, и когда  $k$  зависит от  $x$  (рис. 7).

Если  $k^2(x)$  — большое положительное число, то приближенное решение уравнения (1.5) имеет вид

$$\varphi = f(x) \exp \left\{ \pm i \int k(x) dx \right\}, \quad (1.6)$$

где  $f(x)$  — медленно изменяющаяся функция. Действительно, в этом случае  $\varphi' \approx \pm ik(x)\varphi$  и  $\varphi'' \approx -k^2(x)\varphi \pm ik'(x)\varphi$ . Если  $k(x)$  — достаточно гладкая функция  $x$ , то  $k' \ll k^2$

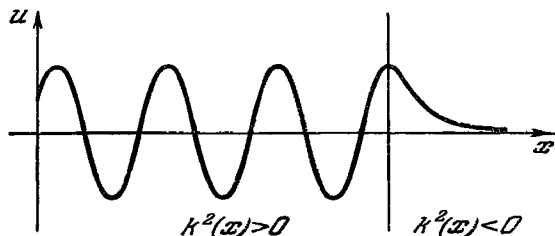


Рис. 7.

для существенных  $x$ . Следовательно, решение (1.6) приближенно удовлетворяет уравнению (1.5). Можно найти и следующую поправку (подробнее см. 3.1). Так как  $\varphi' = \frac{\hbar'}{\hbar} \varphi \pm ik\varphi$  и  $\varphi'' \approx -k^2\varphi \pm ik'\varphi \pm 2ik \frac{\hbar'}{\hbar} \varphi$ , то, подставляя  $\varphi$  и  $\varphi''$  в (1.5), находим

$$2kf' + fk' = 0,$$

или

$$\frac{f'}{f} = - \frac{k'}{2k},$$

откуда

$$f \sim \frac{1}{\sqrt{k}}.$$

Итак, приближенное решение уравнения (1.5) в случае больших положительных  $k^2(x)$  имеет вид

$$\varphi \approx \frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left\{ \pm i \int k(x) dx \right\}. \quad (1.7)$$

Рассмотрим примеры.

а)  $\varphi'' + \alpha x \varphi = 0$   
 $\alpha > 0$

— уравнение для так называемой функции Эйри. Пусть сначала  $x > 0$ . Тогда  $k^2 = \alpha x > 0$ , и согласно (1.7) решение при больших  $x$  имеет вид

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{\sqrt[4]{\alpha x}} e^{\pm \frac{2}{3} i \sqrt{\alpha x^3}}. \quad (1.8)$$

Решение при  $x < 0$  можно получить аналитическим продолжением (1.8):

$$\varphi \underset{|x| \rightarrow \infty}{\approx} \frac{e^{-\pi i/4}}{\sqrt[4]{\alpha |x|}} e^{\pm \frac{2}{3} \sqrt{\alpha |x|^3}}.$$

Дополнительная фаза  $\exp(-\pi i/4)$  возникает при обходе точки ветвления  $x=0$  (подробнее об этом см. 3.1).

$$b) \quad \varphi'' + (\alpha - \beta x^2) \varphi = 0.$$

Если  $\beta x^2 \gg \alpha$ , то  $\int k dx \approx \sqrt{\beta} \int x dx = \frac{1}{2} \sqrt{\beta} x^2$ . Следовательно, асимптотическое решение при больших  $x$  имеет вид

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{\sqrt[4]{\beta x^2}} e^{\pm \frac{1}{2} \sqrt{\beta} x^2}.$$

2. Построим решение по поведению вблизи особых точек. Зная решение дифференциального уравнения вблизи особых точек, можно построить интерполяционные формулы для решения во всей области изменения переменной. В качестве примера рассмотрим уравнение Томаса — Ферми

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{x}} \varphi^{3/2}, \quad \varphi(0) = 1, \quad \varphi(\infty) = 0. \quad (1.9)$$

Оно возникает при нахождении самосогласованного поля атома в квазиклассическом приближении (см. 3.1). Это уравнение имеет две особые точки:  $x=0$  и  $x=\infty$ .

Найдем приближенное решение (1.9) при  $x \rightarrow \infty$ . Будем искать его в виде  $\varphi = A/x^\alpha$ . Подставляя это решение в (1.9), получим

$$A\alpha(\alpha+1)x^{-\alpha-2} = A^{3/2}x^{-\frac{3}{2}\alpha-1/2},$$

откуда  $\alpha+2 = \frac{3}{2}\alpha + \frac{1}{2}$ , т. е.  $\alpha=3$  и  $A^{1/2} = \alpha(\alpha+1)$ ,

т. е.  $A = 144$ . Итак,

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \frac{144}{x^3}.$$

Найдем поправку к этому решению при  $x \rightarrow \infty$ :

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \frac{144}{x^3} + \psi. \quad (1.10)$$

Подставим (1.10) в (1.9). В линейном по  $\psi$  приближении находим

$$\psi'' = \frac{1}{\sqrt{x}} \left( \frac{3}{2} \varphi^{1/2} \psi \right) = \frac{3}{2} \cdot \frac{12}{x^2} \psi. \quad (1.11)$$

Из (1.11) видно, что  $\psi$  степенным образом зависит от  $x$ . Итак,

$$\psi = \frac{B}{x^\beta}.$$

Для  $\beta$  из (1.11) получаем квадратное уравнение

$$\beta(\beta + 1) = 18,$$

откуда  $\beta = \frac{-1 \pm \sqrt{73}}{2}$ . Годится лишь корень  $\beta \approx 3,77 > 0$ , для которого  $\psi \underset{x \rightarrow \infty}{\rightarrow} 0$ . Следовательно,

$$\varphi \underset{x \rightarrow \infty}{\approx} \frac{144}{x^3} + \frac{B}{x^{3,77}}. \quad (1.12)$$

С той же степенью точности, что и в (1.12), решение можно написать в виде

$$\varphi = \frac{144}{x^3 \left( 1 + \frac{C}{x^{0,77}} \right)^n},$$

где  $n$  и  $C$  — пока произвольные числа. Найдем такое  $n$ , чтобы  $\varphi(0)$  было конечно. Для этого должно быть  $3 - 0,77n = 0$ , т. е.  $n = 3,90$ . После этого константу  $C$  можно найти из условия  $\varphi(0) = 1$ :  $144/C^{3,90} = 1$ , откуда  $C = (144)^{0,77/3} = (12^{2/3})^{0,77}$ . Окончательно,

$$\varphi = \frac{1}{\left[ 1 + \left( \frac{x}{12^{2/3}} \right)^{0,77} \right]^{3,90}}. \quad (1.13)$$

Это приближенное решение удовлетворительно согласуется с точным решением, получаемым на машине (см. табл. 1).

Таблица 1

$x$	$\Phi_{\text{прибл}}$	$\Phi_{\text{точн}}$	$x$	$\Phi_{\text{прибл}}$	$\Phi_{\text{точн}}$
0	1	1	2	0,22	0,24
0,3	0,67	0,72	3	0,14	0,16
0,5	0,56	0,61	5	0,072	0,079
1	0,38	0,42			

**Задача.** Найти асимптотическую оценку решения уравнения для вырожденной гипергеометрической функции (уравнение

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0).$$

Ответ.  $u \sim z^{\alpha - \gamma} e^z$ ,  $u \sim |z|^{-\alpha}$ .

$z \rightarrow \infty$                        $z \rightarrow -\infty$

## 2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН

Все физические величины при реальных значениях параметров не должны обращаться в бесконечность. Иными словами, на вещественной оси в реально достижимых областях физические функции конечны. Единственные допустимые особые точки — это точки ветвления. В каждом случае для их появления должны быть физические причины.

В комплексной плоскости параметров физические функции могут иметь различные особые точки. Однако всегда можно выделить области, в которых функции аналитичны.

Из свойств аналитичности можно делать важные заключения о связях между различными физическими величинами. Рассмотрим несколько примеров.

### Зависимость момента инерции ядра от деформации

Для квантовомеханической сферической системы момент инерции равен нулю, так как ее вращение не имеет физического смысла. Рассмотрим момент инерции  $J$  при малых деформациях  $\delta$ . С какого члена начинается разложение  $J$

по степеням  $\delta$ ? Легко убедиться в том, что выражение  $J = A\delta$  неправильно. Предположим, что  $J = A\delta$  для положительных  $\delta$  («огурец»). Так как  $J$  всегда положительная величина, то для отрицательных  $\delta$  («блин») по принципу аналитического продолжения  $J = A|\delta| = A\sqrt{\delta^2}$ . Следовательно, момент инерции как функция  $\delta^2$  имел бы в нуле точку ветвления. Между тем, можно убедиться, что нет никаких причин для появления особой точки. Действительно, перейдем от слабо деформированного ядра к сферическому с помощью соответствующего преобразования координат. В гамильтониане появится малая добавка  $H'$ , пропорциональная величине деформации  $\delta$ . Для конечной системы применение теории возмущений дает сходящийся ряд. Следовательно, момент инерции не имеет особой точки при  $\delta = 0$ . Поэтому разложение  $J$  по степеням  $\delta$  начинается с квадратичного члена

$$J = B\delta^2 + \dots$$

### Зависимость частоты звука от волнового вектора

Как известно, при малых волновых числах  $k$  (т. е. больших длинах волн  $\lambda = 1/k$ ) в некоторых системах могут распространяться звуковые возбуждения с частотой  $\omega = ck$ . Здесь  $c$  — скорость звука. Так как  $\omega$  — скаляр, а  $k$  — вектор, то это соотношение означает  $\omega = c\sqrt{k^2}$ . Итак, при  $k = 0$  частота  $\omega$  как функция  $k^2$  имеет точку ветвления. Объясним, почему здесь возникает особая точка.

Уравнения, описывающие состояние системы, инвариантны при замене  $t \rightarrow -t$ , если нет диссипации. Поэтому уравнение для определения частоты всегда содержит  $\omega^2$ , а не  $\omega$ . Например, в классической механике уравнение Ньютона для каждой колеблющейся частицы при малых колебаниях имеет вид

$$m\ddot{u}_n = -\sum_m F_{mn}u_m.$$

Здесь  $m$  — масса  $n$ -й частицы,  $u_n$  — ее смещение, а  $F_{mn}$  — сила, действующая на  $n$ -ю частицу со стороны  $m$ -й. Полагая  $u_n = u_{0n}e^{i\omega t}$ , получим дисперсионное уравнение для квадрата



частоты звука  $\omega^2$  в виде

$$m\omega^2 u_{0n} = \sum_m F_{mn} u_{0m}.$$

Следовательно, квадрат частоты  $\omega^2$ , а не сама частота  $\omega$ , должен быть аналитической функцией параметров задачи. Поэтому

$$\omega^2 = a + c^2 k^2 + b k^4 + \dots$$

Для звуковых волн  $a=0$ , следовательно, для малых  $k$  частота  $\omega = c|k|$ .

### Аналитические свойства волновой функции

Движение частицы в поле с потенциалом  $V(r)$  определяется волновой функцией  $\Psi$ , которая подчиняется уравнению Шредингера:

$$-\frac{1}{2} \Delta \Psi + V \Psi = E \Psi.$$

Для сферически-симметрического потенциала  $V(r)$  радиальная и угловые переменные разделяются, т. е.

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

причем  $R_{nl}(r)$  удовлетворяет уравнению

$$R'' + \frac{2}{r} R' + 2 \left[ E - V - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] R = 0.$$

Обозначим  $V_l = V + \frac{l(l+1)}{2r^2}$  и заменим  $R = \frac{u}{r}$ . Тогда для  $u$  получается следующее уравнение:

$$u'' + 2(E - V_l) u = 0. \quad (1.14)$$

Так как волновая функция  $R$  во всех точках пространства конечна, то  $u(0) = 0$ .

Известно, что особые точки решения линейного дифференциального уравнения всегда совпадают с особыми точками коэффициентов уравнения (кроме бесконечно удаленной особой точки). Однако особые точки коэффициентов могут и не быть особыми точками решения. Например, в уравнении (1.14) точка  $r=0$  — особая точка

коэффициента уравнения, так как  $V_l \rightarrow \infty$ . Если  $l \neq 0$ , то при малых  $r$  можно пренебречь  $V(r)$  по сравнению с  $l(l+1)/r^2$ . Следовательно, уравнение (1.14) приобретает вид  $r^2 u'' - l(l+1)u = 0$ , откуда  $u_1 \sim r^{l+1}$  или  $u_2 \sim r^{-l}$ . Итак, существует решение  $u_1 \sim r^{l+1}$ , которое не обращается в бесконечность при  $r \rightarrow 0$ .

Итак, особые точки решения уравнения Шредингера (1.14) могут быть только там, где потенциал имеет особенность.

Например, осцилляторный потенциал  $V = \frac{1}{2} \alpha x^2$  имеет особую точку на бесконечности. Поэтому и решение имеет особую точку только на бесконечности.

Кулоновский потенциал, рассматриваемый как функция  $r^2$ , имеет особенность при  $r^2 = 0$ . По этой причине радиальные функции имеют особенность при  $r^2 = 0$ , а именно,  $R_{nl}(r^2)$  имеет в нуле точку ветвления (например, функция основного состояния  $R \sim e^{-V/r^2}$ ). Ниже (стр. 53) мы увидим, что эта особенность кулоновских функций приводит к важным следствиям.

### Амплитуда рассеяния при малых энергиях

$\Psi$ -функция при больших  $r$  в задаче рассеяния имеет асимптотический вид

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + \frac{f}{r} e^{ikr},$$

где  $f$  — амплитуда рассеяния.

Предположим для простоты, что рассеяние сферически-симметрично, т. е.  $f$  не зависит от углов. Рассмотрим сферически-симметричную часть  $\Psi$ :

$$\begin{aligned} \int \Psi \frac{d\Omega}{4\pi} &\equiv \frac{u}{r} = \frac{1}{2} \int_0^\pi e^{ikr \cos \vartheta} \sin \vartheta d\vartheta + \frac{f}{r} e^{ikr} = \\ &= \left( \frac{\sin kr}{k} + f e^{ikr} \right) \frac{1}{r}. \end{aligned}$$

Функцию  $u$  можно представить в виде

$$u = -\frac{1}{2ik} e^{-ikr} + \frac{1+2ikf}{2ik} e^{ikr}. \quad (1.15)$$

Если рассеивающий центр не поглощает и не испускает частиц, то радиальный ток частиц равен нулю. Перекрестные члены сокращаются, и оказывается, что ток равен разности токов, составленных из двух слагаемых  $u$ . Условие равенства этих двух токов дает

$$|1 + 2ikf|^2 = 1,$$

или, иначе,

$$f - f^* = 2ikff^*, \quad \text{Im } f = k|f|^2, \quad (1.16)$$

откуда получаем

$$\text{Im } \frac{1}{f} = -k, \quad f^{-1} = \kappa - ik, \quad (1.17)$$

где  $\kappa$  — вещественное число. Величину  $\kappa$  можно выразить через энергию связанного состояния частицы в рассеивающей яме (если такое состояние существует).

Действительно, функция  $u$  может быть аналитически продолжена из области положительных энергий в область отрицательных, что соответствует мнимым значениям  $k$ . Пусть энергия связанного состояния равна  $-E_0$ . Обозначим  $\kappa_0 = \sqrt{2E_0}$ . Тогда при  $k = \pm i\kappa_0$   $\Psi$ -функция для положительных энергий должна переходить в  $\Psi$ -функцию связанного состояния. Поэтому в выражении для  $u$  при  $k = \pm i\kappa_0$  не должно оставаться слагаемого с растущей экспонентой.

Подставляя (1.17) в выражение (1.15), получим

$$u = -\frac{1}{2ik} \left( e^{-ikr} + \frac{\kappa + ik}{\kappa - ik} e^{ikr} \right).$$

При  $k = i\kappa_0$  получаем

$$u = \frac{1}{2\kappa_0} \left( e^{\kappa_0 r} + \frac{\kappa - \kappa_0}{\kappa + \kappa_0} e^{-\kappa_0 r} \right).$$

Для того чтобы можно было пренебречь растущей экспонентой, необходимо  $\kappa = -\kappa_0$ . При  $k = -i\kappa_0$  получается это же условие. Таким образом, амплитуда рассеяния имеет полюс

$$f = -\frac{1}{\kappa_0 + ik}, \quad (1.18)$$

положение которого определяется энергией связанного состояния.

### Аналитические свойства диэлектрической постоянной

Аналитичность некоторых физических величин, как мы увидим, есть следствие причинности. Рассмотрим, например, аналитические свойства диэлектрической постоянной. Индукция  $D(t)$ , возникающая в системе при наложении электрического поля, определяется амплитудой поля  $E$  во все предыдущие моменты времени  $t - \tau$  ( $\tau > 0$ ). Итак,

$$D(t) = \int_0^{\infty} K(\tau) E(t - \tau) d\tau; \quad (1.19)$$

$K(\tau)$  — вещественная функция, так как она связывает физические величины. Это соотношение вытекает лишь из того, что следствие наступает позже причины. Разложим  $E$  и  $D$  в ряды Фурье:

$$E = \int E_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega, \quad D = \int D_{\omega} e^{-i\omega t} d\omega.$$

Тогда из (1.19) находим

$$D_{\omega} = E_{\omega} \int_0^{\infty} K(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau,$$

откуда диэлектрическая постоянная

$$\epsilon_{\omega} = \frac{D_{\omega}}{E_{\omega}} = \int_0^{\infty} K(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (1.20)$$

Величина  $\epsilon_{\omega}$  аналитична в верхней полуплоскости комплексной переменной  $\omega$ . Действительно, если обозначить  $\omega = \omega_0 + i\omega_1$ , где  $\omega_1 > 0$ , то подынтегральное выражение в (1.20) содержит затухающую экспоненту  $e^{-\omega_1\tau}$ , и поэтому интеграл (1.20) сходится, а следовательно, представляет аналитическую функцию.

Нетрудно видеть, что аналитические свойства  $\epsilon$  и  $1/\epsilon$  совпадают. Рассмотрим длинный и короткий цилиндры вещества, на которые наложено внешнее поле  $E_0$  (рис. 8). В случае длинного цилиндра поле внутри  $E$  равняется внешнему полю  $E_0$ , а индукция  $D = \epsilon E_0$ . В случае короткого цилиндра индукция  $D$  равняется внешнему полю  $E_0$ , а поле внутри  $E = E_0/\epsilon$ .

В первом случае  $D = \int_0^{\infty} K_1(\tau) E_0(t-\tau) d\tau$  и  $\varepsilon = \int_0^{\infty} K_1(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau$ . Во втором случае поле  $E$  определяется значениями  $E_0 = D$  в предыдущие моменты времени,  $E = \int_0^{\infty} K_2(\tau) D(t-\tau) d\tau$ , откуда  $1/\varepsilon = \int_0^{\infty} K_2 e^{i\omega\tau} d\tau$ . Таким

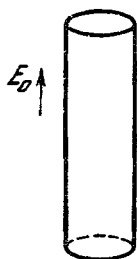


Рис. 8.

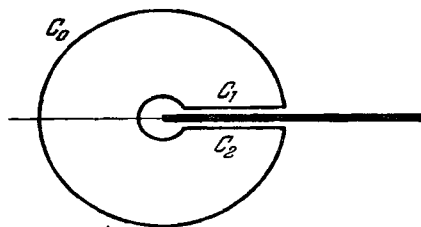


Рис. 9.

образом, аналитические свойства  $\varepsilon$  и  $1/\varepsilon$  совпадают. Следовательно, диэлектрическая постоянная не имеет ни полюсов, ни нулей в верхней полуплоскости.

Так как  $\varepsilon(i\omega_1) = \int_0^{\infty} K(\tau) e^{-\omega_1\tau} d\tau$ , то ввиду вещественности подынтегрального выражения и  $\varepsilon(i\omega_1) |_{\omega_1 > 0}$  вещественна, т. е.

$$\operatorname{Im} \varepsilon(i\omega_1) = 0.$$

Используя аналитичность, можно выразить вещественную часть диэлектрической постоянной через ее мнимую часть. Рассмотрим комплексную плоскость  $\omega^2$ . В этом случае область аналитичности  $\varepsilon$  представляет собой первый лист римановой плоскости — все особые точки лежат на втором листе. Первый лист переходит во второй через разрез, идущий вдоль положительных  $\omega^2$  от точки  $\omega^2 = 0$  (рис. 9). Согласно теореме Коши

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{f(z') dz'}{z - z'},$$

где  $C$  — замкнутый контур, не содержащий внутри себя особых точек  $f(z)$ . Применим эту теорему к  $\varepsilon(\omega^2)$ , взяв в качестве  $C$  контур, изображенный на рис. 9. При больших  $\omega^2$ , как мы увидим,  $\varepsilon(\omega^2)$  имеет вид  $\varepsilon \rightarrow 1 - \frac{c_1}{\omega^2}$ . Поэтому для того, чтобы интеграл по контуру  $C_0$  обращался в нуль, нужно в качестве  $f$  взять функцию  $f = \varepsilon - 1$ . Итак,

$$\varepsilon(\omega^2) - 1 = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{\varepsilon(\omega_1^2) - 1}{\omega_1^2 - \omega^2} d\omega_1^2. \quad (1.21)$$

Из рис. 9 видно, что этот интеграл сводится к обходу разреза. Обозначим через  $\varepsilon_1(\omega^2)$  значение  $\varepsilon$  на верхнем берегу разреза, а через  $\varepsilon_2(\omega^2)$  значение  $\varepsilon$  на нижнем берегу. Покажем, что  $\varepsilon_2(\omega^2) = [\varepsilon_1(\omega^2)]^*$ . Мы видели, что  $\varepsilon$  вещественно на мнимой верхней полуоси плоскости  $\omega$ . Следовательно, в плоскости  $\omega^2$  величина  $\varepsilon$  вещественна на полуоси  $\omega^2 < 0$ . Продолжая аналитически это соотношение на верхний и нижний берега разреза, получаем

$$\varepsilon_1(\omega^2) = [\varepsilon_2(\omega^2)]^* \mid_{\omega^2 > 0}. \quad (1.22)$$

Учитывая (1.22), из (1.21) находим

$$\varepsilon(\omega^2) - 1 = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_1} \frac{\varepsilon_1(\omega_1^2) - \varepsilon_2(\omega_1^2)}{\omega_1^2 - \omega^2} d\omega_1^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{C_1} \frac{2 \operatorname{Im} \varepsilon(\omega_1^2) d\omega_1^2}{\omega_1^2 - \omega^2}.$$

Итак,

$$\varepsilon(\omega^2) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{Im} \varepsilon(\omega_1^2) d\omega_1^2}{\omega_1^2 - \omega^2}, \quad (1.23)$$

т. е., зная мнимую часть диэлектрической постоянной  $\varepsilon$ , можно восстановить всю величину  $\varepsilon$ .

Мнимая часть диэлектрической постоянной, определяющая поглощение электромагнитных волн системой, отлична от нуля только, когда частота волн совпадает с собственными частотами системы  $\omega_n$ . Иными словами,

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega^2) = \sum_n \pi f_n \delta(\omega^2 - \omega_n^2). \quad (1.24)$$

Подставляя (1.24) в (1.23), получаем

$$\varepsilon(\omega^2) = 1 + \sum_n \frac{f_n}{\omega_n^2 - \omega^2}. \quad (1.25)$$

При  $\omega^2 \gg \omega_n^2$  величина  $\varepsilon$  должна перейти в диэлектрическую постоянную идеального газа электронов, т. е.  $\varepsilon \rightarrow 1 - \frac{4\pi n e^2}{m\omega^2}$ , где  $n$  — число электронов в единице объема, а  $m$  — масса электрона. Таким образом, из (1.23) и (1.25) получаем

$$\frac{1}{\pi} \int \operatorname{Im} \varepsilon(\omega_1^2) d\omega_1^2 = \frac{4\pi n e^2}{m} = \sum_n f_n.$$

Это соотношение называется правилом сумм.

### Аналитические свойства амплитуды рассеяния

Аналогичным способом доказываются аналитические свойства амплитуды рассеяния. Рассмотрим, например, рассеяние света заряженной системой. Пусть амплитуда рассеянной волны характеризуется величиной  $B$ , а падающей —  $A$ . Эти величины связаны друг с другом соотношением

$$B(t) = SA(t), \quad (1.26)$$

где  $S$  — некоторый интегральный оператор. Сделаем предположение, что до момента времени  $t = 0$  амплитуда падающей волны на некоторой контрольной плоскости, расположенной до рассеивающей системы, равна нулю. Относительно  $B$  можно утверждать, что  $B(t) = 0$  для  $t < t_1$ , где  $t_1 > 0$ .

Перейдем к фурье-компоненте  $A_\omega = \int_0^\infty A(t) e^{i\omega t} dt$ . Так как  $A(t) = 0$  при  $t < 0$ , то  $A_\omega$  не имеет особенностей в верхней полуплоскости. Аналогично имеем  $B_\omega = \int_{t_1 > 0}^\infty B(t) e^{i\omega t} dt$ , т. е.  $B_\omega$  также не имеет особенностей в верхней полуплоскости. Из (1.26) следует, что  $B_\omega = SA_\omega$ . Отсюда видно, что величина  $S$  может иметь особенности лишь в нулях  $A$ . Но  $S$  не может зависеть от частного вида  $A$ , следовательно,  $S$  вообще не может иметь особенностей в верхней полуплоскости. Оператор  $S$  линейно связан с амплитудой рассеяния  $f$  света. Поэтому дисперсионное соотношение для  $f$

аналогично дисперсионному соотношению для диэлектрической постоянной  $\epsilon$  (1.23):

$$f(\omega^2) = \frac{1}{\pi} \int \frac{\text{Im } f(\omega_1^2) d\omega_1^2}{\omega_1^2 - \omega^2}.$$

В случае рассеяния света заряженной системой такое выражение для амплитуды неверно, так как амплитуда при больших частотах стремится не к нулю, а к сумме амплитуд рассеяния на свободных частицах. Поэтому дисперсионное соотношение нужно применять не к величине  $f$ , а к величине  $f(\omega^2) - f(\infty)$  аналогично тому, как это делалось в случае диэлектрической постоянной.

### 3. ОЦЕНКИ В АТОМНОЙ МЕХАНИКЕ

В этом разделе будут получены основные результаты атомной механики. Для получения соотношений мы будем использовать, кроме размерных, также модельные оценки. Идея модельных оценок состоит в рассмотрении предельных случаев и упрощенных вариантов задачи.

#### Оценки скоростей и размеров орбит внутренних электронов атома

Для оценки скорости электрона на внутренней орбите атома нужно составить величину с размерностью скорости из величин, определяющих структуру атома, т. е. из массы электрона  $m$ , постоянной Планка  $\hbar$  и произведения заряда ядра и заряда электрона  $Ze \cdot e$ . Действительно, в уравнение движения заряд электрона входит только в виде произведения на заряд ядра, поскольку при рассмотрении внутренних электронов влиянием других электронов можно пренебречь. Задача нерелятивистская, поэтому скорость света не войдет. Единственная величина размерности скорости, которую можно составить из  $m$ ,  $\hbar$  и  $Ze^2$  — это  $v \propto Ze^2/\hbar$ .

Для оценки порядка величины радиуса внутренних орбит электрона  $a$  воспользуемся тем, что потенциальная энергия электрона  $Ze^2/a$  порядка его кинетической энергии  $mv^2$ , т. е.  $Ze^2/a \sim mv^2$  или  $a \sim \hbar^2/Zme^2$ .



Из оценок  $\alpha$  и  $\nu$  видно, что при рассмотрении атомных явлений удобны единицы  $e = \hbar = m = 1$  (так называемые атомные единицы). В этих единицах скорость света  $c = 137,2$ , а масса протона  $M = 1840$ .

### Стационарные состояния

Рассмотрим движение частицы в потенциальной яме (рис. 10). Уравнение Шредингера для этого случая имеет вид

$$\Psi'' + k^2\Psi = 0,$$

причем  $k^2 = 2(E - V)$ . В классически доступной области потенциальная энергия  $V$  меньше полной энергии  $E$ . Следовательно, волновая функция  $\Psi$  осциллирует в этой области (см. 1.1). В области, где  $E < V$ ,  $\Psi$ -функция экспоненциально затухает. Энергию стационарных состояний можно оценить из условия, что характерный размер  $l$  области, в которой может двигаться частица, содержит целое число  $n$  полуволен де-Бройля.

Стационарные уровни энергии нельзя получить, исходя из одних лишь размерных соображений, так как величина  $n$  безразмерна. Мы будем делать модельные оценки, заменяя реальную потенциальную яму ящиком (рис. 11) с длиной, зависящей от энергии частицы. Длина де-бройлевской волны

$$\lambda = 1/p = 1/\sqrt{2(E - V)},$$

где  $p$  — импульс частицы. Для произвольной потенциальной ямы  $\lambda$  зависит от координаты  $x$ . Для оценки всегда можно считать  $\lambda \sim 1/\sqrt{2E}$ , если  $E$  отсчитано от дна ямы.

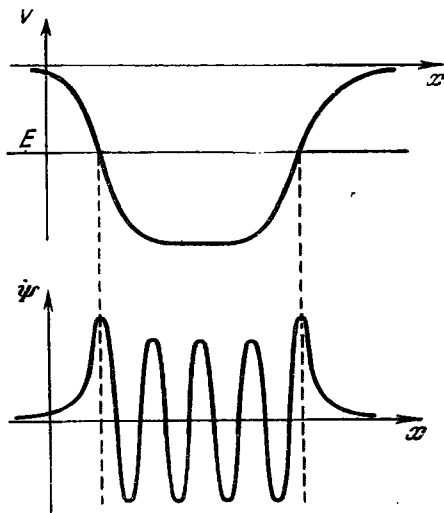


Рис. 10.

Итак, оценка стационарных уровней системы  $E_n$  получается из соотношения

$$L(E_n) \approx \frac{n}{2} \lambda \sim \frac{2\pi n}{2\sqrt{2E_n}}, \quad (1.27)$$

где  $L(E_n)$  — характерная длина области, в которой может двигаться частица.

Для прямоугольной ямы величина  $L(E_n) = L$  — длине ямы.

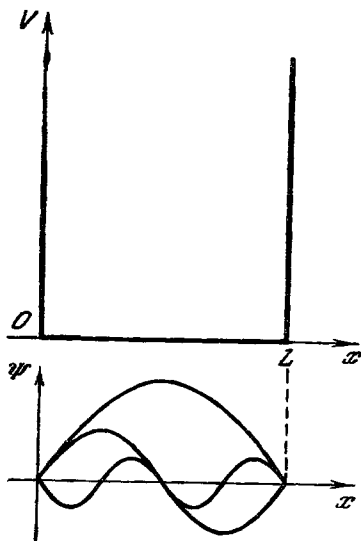


Рис. 11.

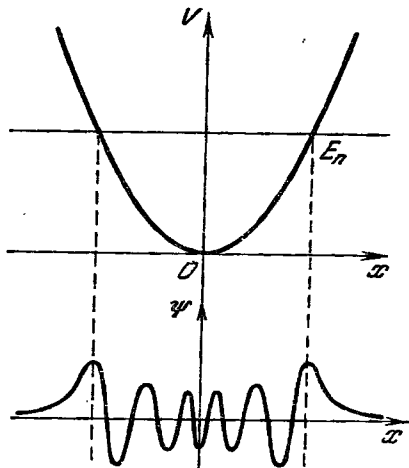


Рис. 12.

Следовательно,  $L = \frac{\pi n}{\sqrt{2E_n}}$ , откуда  $E_n = \frac{\pi^2 n^2}{2L^2}$ . Это выражение удовлетворяет принципу соответствия Бора: при больших квантовых числах расстояние между соседними энергетическими уровнями должно равняться классической частоте движения. Действительно,

$$\frac{dE_n}{dn} = 2 \frac{\pi^2 n}{2L^2} = \frac{\pi n}{L} \frac{2\pi}{2L} = \frac{2\pi}{2L \left| \frac{\pi n}{L} \right|} = \frac{2\pi}{2L/v} = \frac{2\pi}{T_{\text{кл}}},$$

где  $T_{\text{кл}}$  — классический период движения, равный  $2L/v$ .

Следующий пример — одномерный осциллятор, потенциальная энергия которого  $V = \frac{1}{2} \omega^2 x^2$ . Здесь  $\omega$  — частота классического осциллятора. Заметим, что частота осцилляций  $\Psi$ -функции около начала координат (рис. 12) больше, чем

у краев ямы. Действительно, при  $x=0$  кинетическая энергия движения максимальна, следовательно, длина волны  $\lambda$  минимальна. При заданной энергии  $E_n$  характерная длина области  $L$ , в которой может двигаться частица, находится из условия  $V(L) = E_n$ . Итак,  $\frac{1}{2} \omega^2 L_n^2 \sim E_n$ , откуда  $L_n \sim \sqrt{E_n}/\omega$ .

Условие квантования (1.27) имеет вид  $\sqrt{E_n}/\omega \sim n/\sqrt{E_n}$ , откуда  $E_n = C_1 n \omega$ . Из принципа соответствия следует, что  $C_1 = 1$ .

Как известно, точное решение задачи приводит к спектру осциллятора  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega$ , т. е. при  $n=0$  энергия колебаний отлична от нуля. Это связано с соотношением неопределенностей: частица, движущаяся в малой области  $d$ , не может иметь импульс, меньший  $\sim 1/d$ . Энергия  $E$  имеет оценку  $E \sim \frac{1}{d^2} + \omega^2 d^2$ . Возь-

мем минимум этого выражения. Эта минимизация соответствует вариационному принципу квантовой механики:  $E = \min(\psi | H | \psi)$ . В данном случае  $\psi$ -функция зависит от одного лишь параметра  $d$ . Выражение для  $E$  минимально при  $d \sim 1/\sqrt{\omega}$ . При этом  $E_{\min} = C_2 \omega$  ( $C_2 = 1/2$ ). Величина  $d_{\min}^2 \sim 1/\omega$  дает оценку квадрата амплитуды нулевых колебаний.

Рассмотрим движение в кулоновом поле (рис. 13). Ограничимся случаем  $l=0$  (случай  $l \neq 0$  будет рассмотрен квазиклассически на стр. 138). Существенная длина движения  $L$  находится из условия  $E \sim Z/L$ , т. е.  $L \sim Z/E$ . Из условия квантования (1.27) находим  $Z/E_n \sim n/\sqrt{E_n}$ , т. е.  $E_n = C_1 \frac{Z^2}{n^2}$ . Число  $C_1$  найдем из принципа соответствия:

$$\frac{dE_n}{dn} = -C_1 \frac{2Z^2}{n^3} = \omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T_{\text{кл}}}$$

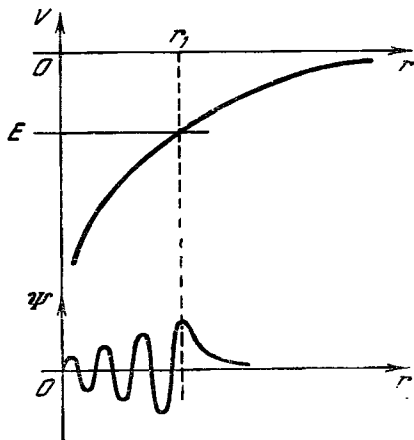


Рис. 13.

Период классического движения

$$T_{\text{кл}} = 2 \int_0^{r_1} \frac{dr}{v} = 2 \int_0^{-Z/E} \frac{dr}{\sqrt{2(E_n + Z/r)}} = \frac{2\pi Z}{(2E_n)^{3/2}}.$$

Итак,  $-C_1 \frac{2Z^2}{n^3} = \frac{2\pi}{2\pi Z} \left(-2C_1 \frac{Z^2}{n^2}\right)^{3/2}$ , откуда  $C_1 = -\frac{1}{2}$ . Окончательно  $E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2}{n^2}$ , что, как известно, совпадает с точным решением.

### Распределение электрического заряда в атоме

Распределение заряда в тяжелых атомах можно вычислять с помощью приближенного метода, называемого методом Томаса—Ферми. При этом используется тот факт, что в тяжелом атоме большинство электронов имеет большие квантовые числа. Длины волн электронов при этом малы по сравнению с областью изменения потенциала. Тогда плотность электронов в каждой точке атома можно рассчитывать так же, как и плотность свободных электронов в потенциальном ящике с плоским дном.

Пусть наибольший импульс электронов в данной точке равен  $p_0$ . Тогда число состояний в интервале  $(p, p + dp)$  равно  $d\mathbf{p}/(2\pi)^3$ . Поскольку в основном состоянии атома электроны должны заполнять все состояния с импульсом, меньшим  $p_0$ , то число электронов в единице объема равно

$$n = 2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} = 2 \frac{4}{3} \pi p_0^3 \frac{1}{(2\pi)^3}$$

(множитель 2 возникает из-за двух возможных проекций спина электрона).

Обозначим через  $\varphi(r)$  электростатический потенциал атомного поля. Согласно уравнению Пуассона

$$\Delta\varphi = 4\pi n,$$

т. е.

$$\Delta\varphi \sim p_0^3.$$

Свяжем  $p_0$  с  $\varphi$ . Полная энергия электрона равна  $\frac{p^2}{2} - \varphi(r)$ . Пусть  $\varepsilon_0 \rightarrow$  максимальное значение полной энергии в каждой

точке атома, т. е.

$$\varepsilon_0 = \frac{p_0^2}{2} - \varphi(r).$$

Величина  $\varepsilon_0$  должна быть постоянной, иначе электроны будут переходить из точек с большей энергией в точки с меньшей энергией. Из двух последних формул находим

$$\Delta\varphi \sim (\varphi + \varepsilon_0)^{3/2}$$

или

$$\Delta\varphi \sim \varphi^{3/2},$$

если отсчитывать  $\varphi$  от  $-\varepsilon_0$ .

Определим радиус  $l$  области, в которой находится большинство атомных электронов. Из последней формулы имеем по порядку величины

$$\frac{\varphi}{l^2} \sim \varphi^{3/2}, \text{ откуда } l \sim \varphi^{-1/4}.$$

С другой стороны, величину  $l$  можно связать с числом всех электронов атома  $Z$ :

$$Z \sim nl^3$$

или, учитывая соотношение  $\Delta\varphi \sim \varphi^{3/2}$ ,

$$Z \sim \Delta\varphi l^3 \sim \frac{\varphi}{l^2} l^3 \sim \varphi l.$$

Сравнивая два последних выражения, находим  $Z \sim l^{-4} \cdot l$  или

$$l \sim \frac{1}{Z^{1/3}}.$$

Средняя энергия  $\varepsilon$  атомного электрона по порядку величины равна электростатическому потенциалу  $\varphi(l)$ . Так как  $l \sim \varphi^{-1/4}$ , то получаем

$$\varepsilon \sim l^{-4} \sim Z^{4/3}.$$

Полная энергия всех электронов  $E$  имеет порядок величины

$$E \sim \varepsilon Z \sim Z^{7/3}.$$

Число узлов волновой функции есть  $l\sqrt{\varepsilon} \sim Z^{1/3}$ .

Итак, радиус  $K$ ,  $L$ -оболочки атома  $r_K \sim 1/Z$ , расстояние  $l$  (томас-фермиевский радиус)  $\sim 1/Z^{1/3}$  и радиус наружных

оболочек  $\sim 1$ , поскольку эффективный заряд для электронов наружных оболочек  $\sim 1$ .

Распределение электрического заряда в атоме рассматривается в разделе 3.2 подробнее.

### Формула Резерфорда

Рассмотрим рассеяние легкой частицы с массой  $m$  и зарядом  $e$  на тяжелой частице с зарядом  $Ze$  в нерелятивистском классическом случае. Сечение рассеяния не зависит от массы тяжелой частицы; оно определяется скоростью налетающей частицы  $v$ , ее массой и зарядами  $e$  и  $Ze$ . Из закона Кулона следует билинейность сечения по зарядам,

т. е. сечение  $\sigma$  будет зависеть лишь от комбинации  $Ze^2$ . Из этих параметров можно составить только одну величину с размерностью длины, а именно  $Ze^2/mv^2$ ; следовательно, сечение рассеяния

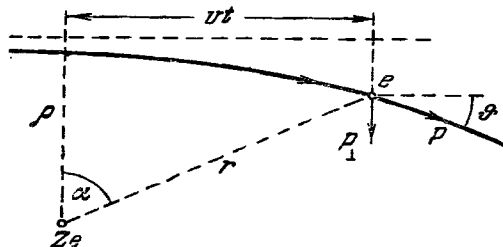


Рис. 14.

$$\sigma(\theta) = \left( \frac{Ze^2}{mv^2} \right)^2 f(\theta).$$

Найдем зависимость сечения от угла рассеяния в предельном случае малых углов. Угол отклонения  $\theta$  приближенно равен (рис. 14)  $\theta \approx p_{\perp}/p$ , где  $p$  — импульс частицы, а  $p_{\perp}$  — импульс, возникающий в направлении, перпендикулярном к исходному. Вычислим  $p_{\perp}$ :

$$\begin{aligned} p_{\perp} &= \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Ze^2}{r^2} \cos \alpha dt = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Ze^2 \rho dt}{(\rho^2 + v^2 t^2)^{3/2}} = \frac{2Ze^2}{\rho v} \int_0^{\infty} \frac{dx}{(1+x^2)^{3/2}} = \frac{2Ze^2}{\rho v} \end{aligned}$$

(интеграл берется сразу заменой  $x = \operatorname{tg} y$ ); здесь  $\rho$  — прицельное расстояние (см. рис. 14). Следовательно,

$$\theta(\rho) = \frac{2Ze^2}{mv^2 \rho}. \quad (1.28)$$

По определению дифференциального сечения рассеяния:

$$d\sigma = \rho \, d\rho \, d\varphi = \rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| d\theta \, d\varphi = \rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| \frac{\sin \theta \, d\theta \, d\varphi}{\sin \theta},$$

или

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \rho \left| \frac{d\rho}{d\theta} \right| \frac{1}{\sin \theta}. \quad (1.29)$$

Используя (1.28) и (1.29), получаем формулу Резерфорда для малых углов рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{2Ze^2}{mv^2} \right)^2 \frac{1}{\theta^4}. \quad (1.30)$$

### Неприменимость классической механики при больших прицельных параметрах

В классической механике полное сечение рассеяния

$$\sigma = \int_0^{\infty} 2\pi\rho \, d\rho$$

обращается в бесконечность для любых потенциалов (кроме обрывающихся, как, например, потенциал твердого шарика). В квантовой механике полное сечение конечно для потенциалов, убывающих с расстоянием быстрее, чем  $1/r^2$  (см. задачу). Покажем, что классическая механика становится неприменимой при достаточно малых углах рассеяния, т. е. при достаточно больших прицельных параметрах  $\rho$ . Мы увидим, что с увеличением прицельного параметра угол квантовомеханической дифракции  $\theta_d$  уменьшается медленнее, чем угол классического рассеяния  $\theta_{кл}$ . Поэтому, начиная с некоторого прицельного параметра  $\rho_1$  угол  $\theta_d$  становится больше  $\theta_{кл}$ . Следовательно, дифференциальное сечение рассеяния для прицельных параметров рассеяния, бóльших  $\rho_1$ , нужно рассчитывать по квантовомеханическим формулам. Итак, хотя длина волны  $\lambda$  здесь много меньше характерного размера, т. е.  $\rho_1$ , условия классичности рассеяния не выполняются, т. е. условие  $\lambda \ll \rho_1$  — необходимое, но вовсе не достаточное условие применимости классической механики.

Получим критерий применимости классической механики. Согласно оценке  $\theta_{\text{кл}} \approx p_{\perp}/p$  заключаем, что

$$\theta_{\text{кл}} \sim F_{\perp} \Delta t / p \sim \frac{\partial V}{\partial p} \frac{\Delta t}{p} \sim \frac{V(\rho) \Delta t}{p \rho} \sim \frac{V(\rho)}{p v}, \text{ т. е. } \theta_{\text{кл}} \sim \frac{V(\rho)}{E}.$$

Здесь мы предположили, что  $\frac{\partial V}{\partial p} \sim \frac{V}{p}$  (см. стр. 8) ( $E$  — энергия частицы,  $V$  — потенциал взаимодействия).

Для нахождения угла дифракции рассмотрим следующий опыт. Экран с отверстием диаметра  $a$  ограничивает прицельные параметры рассеяния значениями  $\rho \pm a$  (рис. 15). Для применимости классической механики необходимо, чтобы ширина щели  $a$  была много

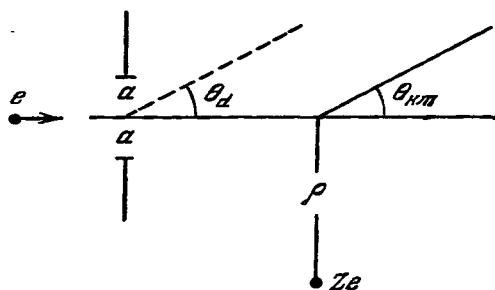


Рис. 15.

меньше прицельного параметра  $\rho$ , иначе само понятие прицельного параметра теряет смысл. При сужении отверстия возникает дифракционное рассеяние. Чтобы можно было наблюдать отклонение, необходимо, чтобы дифракционный угол был много меньше угла рассеяния.

Из соотношения неопределенностей видно, что неопределенность в координате  $a$  соответствует неопределенности в поперечном импульсе  $\Delta p \sim \hbar/a$ . Следовательно, угол дифракции

$$\theta_d \sim \frac{\Delta p}{p} \sim \frac{1}{p a},$$

где  $p$  — импульс налетающей частицы. Для применимости классической механики необходимо, чтобы  $\theta_{\text{кл}} \gg \theta_d$ , или  $\theta_{\text{кл}} \gg 1/pa$ . Тем более,

$$\theta_{\text{кл}} = \frac{V(\rho)}{E} \gg \frac{1}{p \rho}.$$

Это — общий критерий применимости классической механики для задачи рассеяния. Для потенциалов, спадающих с расстоянием быстрее, чем кулоновский, классический угол рассеяния убывает с ростом прицельного параметра сильнее,



чем  $1/\rho$ . Поэтому всегда найдется прицельный параметр  $\rho_1$ , для которого  $\theta_{\text{кл}} \sim \theta_d$ . В случае Резерфордского рассеяния  $\theta = \frac{2Ze^2}{\rho v}$  и рассеяние будет для всех углов классическим, если  $Ze^2/\hbar v \gg 1$ .

### Оценка сечения рассеяния для потенциалов, спадающих с расстоянием быстрее, чем кулоновский

Мы получили, что классическая механика неприменима при прицельных параметрах, больших  $\rho_1$ , которое определяется из условия равенства классического угла рассеяния дифракционному:

$$\frac{\hbar}{\rho_1 p} = \theta_{\text{кл}}(\rho_1), \quad (1.31)$$

т. е. величина  $\rho_1$  находится из соотношения

$$\frac{\hbar}{\rho_1 p} \sim \frac{V(\rho_1)}{E} \quad (1.32)$$

( $E$  — энергия влетающей частицы). Из (1.32) можно найти  $\rho_1$  для любого конкретного вида потенциала  $V(\rho)$ , спадающего с расстоянием быстрее кулоновского (для последнего обе части соотношения (1.32) пропорциональны  $1/\rho$ , т. е.  $\rho_1$  найти нельзя). Следовательно, при  $\rho < \rho_1$  дифференциальное сечение рассеяния можно вычислять по формулам классической механики.

Полное сечение рассеяния

$$\sigma = \pi \rho_1^2 + \sigma_{\text{диф}},$$

где  $\sigma_{\text{диф}}$  — дифракционное сечение рассеяния.

Если потенциал достаточно быстро убывает ( $V(r) < 1/r^2$ , см. задачу), то  $\sigma_{\text{диф}}$  может быть оценено как дифракционное сечение рассеяния на экране радиуса  $\rho_1$ , т. е.  $\sigma_{\text{диф}}$  имеет порядок  $\pi \rho_1^2$ , так что

$$\sigma \sim 2\pi \rho_1^2.$$

Оценим полное сечение рассеяния для степенного потенциала  $V = \alpha/r^n$ . Из формулы (1.32) находим  $\frac{1}{\rho_1 p} \sim \frac{\alpha}{\rho_1^n E}$ ,

откуда  $\rho_1 \sim (\alpha/v)^{\frac{1}{n-1}}$ . Следовательно,

$$\sigma \sim 2\pi\rho_1^2 \sim 2\pi\left(\frac{\alpha}{v}\right)^{\frac{2}{n-1}}.$$

При  $n$ , близком к 2, эта оценка не годится (см. задачу).

**Задача.** Определить, при какой степени убывания потенциала полное сечение рассеяния конечно.

### Резонансные эффекты при рассеянии

Рассмотрим сначала рассеяние на потенциале, имеющем сильно оттавливающую сердцевину (рис. 16). Обозначим через  $V_0$  и  $a$  соответственно высоту и ширину потенциального барьера. Предположим, что  $V_0 \gg E$  — энергии налетающей частицы. Тогда на границе барьера волновая функция обращается в нуль:  $\Psi(a) = 0$ . Рассмотрим для простоты сферически-симметричное рассеяние и предположим, что при  $r > a$  частица движется свободно, т. е. ее волновая функция есть сумма падающей плоской волны  $e^{ikz}$  и расходящейся сферической волны  $\frac{f}{r}e^{ikr}$ , где  $f$  — амплитуда рассеяния.

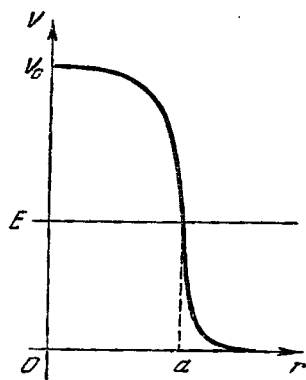


Рис. 16.

Плоская волна  $e^{ikz}$  имеет сферически-симметричную часть, равную  $\frac{\sin kr}{kr}$ . Действительно, если разложить  $e^{ikz}$  в ряд по полиномам Лежандра:  $e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(\cos \theta)$ , то  $f_0 = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} \sin \theta d\theta = \frac{\sin kr}{kr}$ . Итак,

$$\int \Psi \frac{d\Omega}{4\pi} \Big|_{r>a} = \frac{\sin kr}{kr} + \frac{f}{r} e^{ikr}.$$

Используя граничное условие  $\Psi(a) = 0$ , находим  $\frac{\sin ka}{k} + f e^{ika} = 0$ , или

$$f = -\frac{\sin ka}{k} e^{-ika}.$$

Если энергия частицы такова, что  $ka = n\pi$ , где  $n$  — целое число, то  $f = 0$ , т. е. сечение  $s$ -рассеяния обращается в нуль. Этот резонансный эффект для отталкивательного потенциала ослаблен тем, что при  $ka \geq 1$  в рассеянии существенны и волны с  $l \neq 0$ . Поэтому полное сечение рассеяния не обращается в нуль.

Как видно из выражения для амплитуды рассеяния, наибольшее сечение получается при  $ka = (2n + 1) \frac{\pi}{2}$ :  $\sigma = 4\pi\lambda^2$ . При малых  $k$  ( $ka \ll 1$ ) сечение  $\sigma = 4\pi a^2$ .

Резонансные эффекты при рассеянии используются в так называемой просветленной оптике: на поверхность линзы наносится слой вещества такой толщины, чтобы разность фаз от слоя и линзы составила целое число  $\pi$ . В результате на поверхности линзы не происходит отражения света и все потери обусловлены лишь поглощением.

Аналогичное явление происходит при рассеянии частиц на потенциальной яме ( $V < 0$ ). Как и в случае  $V > 0$ , сечение рассеяния принимает различные значения в зависимости от фазы волновой функции у края ямы. При определенных значениях фазы сечение обращается в нуль. Этот эффект наблюдался впервые Рамзауэром при рассеянии электронов на атомах. Классическая теория рассеяния не может объяснить это явление. Другой пример, где классическая механика решительно противоречит эксперименту, — это захват медленных нейтронов ядрами. Сечение этого процесса ( $\sim 4\pi\lambda^2$ ) превышает классическое сечение ( $\sigma_{\text{кл}} = \pi R^2$ , где  $R$  — радиус ядра) в десятки тысяч раз.

### Взаимодействие между атомами

Оценим величину взаимодействия нейтрального атома с ионом и с нейтральным атомом на больших расстояниях. Ион создает электрическое поле  $E = Z_1/r^2$ , где  $Z_1$  — заряд иона. Нейтральный атом, находящийся в электрическом поле  $E$ , приобретает дипольный момент  $d = \alpha E$ , где  $\alpha$  — поляризуемость атома. Следовательно, взаимодействие иона с нейтральным атомом  $V = -Ed = -Z_1^2 \alpha / r^4$ . В атомных единицах  $\alpha \sim 1$ , так как главную роль в поляризации атома играют наружные оболочки, для

которых все величины  $\sim 1$  в атомных единицах. Таким образом,  $V \sim -Z_1^2/r^4$ .

Рассмотрим теперь случай, когда оба атома нейтральны. Они индуцируют друг у друга дипольные моменты  $\bar{d}_1$  и  $\bar{d}_2$ . Диполь-дипольное взаимодействие между атомами равно  $V \sim -\bar{d}_1 \bar{d}_2/r^3$ .

Среднее значение  $\bar{d}_1$  и  $\bar{d}_2$  по основному состоянию равно нулю, так как атомы не имеют постоянных дипольных моментов. Однако среднее значение  $\bar{d}_1^2$ ,  $\bar{d}_2^2$  отлично от нуля, так как дипольный момент колеблется со всеми возможными атомными частотами:

$$\bar{d} = \sum_{\omega} d_{\omega} e^{i\omega t}.$$

Дипольный момент  $d_{1\omega}$  создает поле  $E_{\omega} \sim \frac{d_{1\omega}}{r^3}$ . Момент  $d_{2\omega}$  в этом поле равен  $d_{2\omega} = \alpha_2 E_{\omega}$ . Подставляя  $d_{2\omega}$  в энергию взаимодействия, получим после усреднения по времени:

$$V \sim \sum_{\omega} d_{2\omega} E_{\omega} = -\frac{1}{r^6} \sum_{\omega} d_{1\omega}^2 \alpha_2(\omega) \sim -\frac{1}{r^6}.$$

### Ионизация атомов

Оценим потери энергии при движении быстрого электрона в газе. Налетающий электрон, сталкиваясь с электронами атомных оболочек, выбрасывает их из атома. При большой энергии налетающего электрона его угол отклонения  $\vartheta$  мал. Поэтому сечение рассеяния на одном электроном оболочки определяется формулой  $\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim \frac{1}{p^4 \vartheta^4}$ ; здесь  $p$ —импульс электрона.

Обозначим через  $q$  изменение импульса налетающего электрона; величина  $q$  связана с углом рассеяния  $\vartheta$  соотношением  $q \approx p\vartheta$ . Энергия  $\Delta E$ , передаваемая при столкновении, равна  $q^2/2$ . Потеря энергии электрона на единице длины пути равна:

$$\frac{dE}{dx} = -nZ \int \Delta E d\sigma,$$

где  $nZ$ —полное число электронов в единице объема,  $d\sigma$ —

дифференциальное сечение. Имеем:

$$\begin{aligned} -\frac{dE}{dx} &\sim Zn \int q^2 \frac{1}{p^4} \frac{1}{\vartheta^4} \vartheta d\vartheta = \\ &= Zn \int q^2 \frac{1}{p^4} \frac{p^2 dq}{q^3} = Zn \frac{1}{p^2} \int \frac{dq}{q} = \frac{Zn}{p^2} \ln \frac{q_{\max}}{q_{\min}}. \end{aligned}$$

Максимальный классический угол отклонения  $\vartheta_{\max}^{\text{кл}} \sim 1$ , но он соответствует прицельным параметрам, много меньшим длины волны налетающей частицы. Такие прицельные параметры квантовомеханически бессмысленны. Минимальный прицельный параметр, о котором можно говорить в квантовой механике, имеет порядок длины волны  $\lambda$ .

Отсюда  $\vartheta_{\max} \sim \frac{1}{\rho_{\min} E} \sim \frac{1}{p}$  и  $q_{\max} \sim p\vartheta_{\max} \sim 1$ .

Минимальный передаваемый импульс соответствует случаю, когда время пролета электрона  $\tau$  сравнивается с собственными временами (обратными частотами) атома  $1/\omega_0$ . При больших временах пролета поле налетающего электрона не содержит фурье-компонент с атомными частотами и вероятность ионизации резко убывает. Величина  $\tau \sim \rho/v$ , где  $v$  — скорость налетающего электрона. Итак,  $q_{\min}$  находится из условия  $\frac{\rho}{v} \sim \frac{1}{\omega_0}$ . Так как  $\vartheta \sim 1/\rho E$ , то  $\vartheta_{\min} \sim \omega_0/vE$ , а  $q_{\min} \sim p\vartheta_{\min} \sim p\omega_0/vE \sim \omega_0/p^2$ . Следовательно,

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{Zn}{p^2} \ln \frac{p^2}{\omega_0}.$$

Как мы видели (см. стр. 36), основная масса электронов атома расположена в области радиуса  $a_0/Z^{1/3}$  и энергия каждого из них  $\sim Z^{4/3}$ . Величина  $\omega_0$  имеет порядок  $v/a \sim Z^{2/3}/Z^{-1/3} \sim Z$ . Поэтому

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{Zn}{p^2} \ln \frac{p^2}{Z}.$$

### Множественное рассеяние

Узкий пучок электронов при прохождении через среду размывается по углам из-за многократного рассеяния. Действительно, хотя отклонение электрона, скажем, направо и налево, равновероятно, средний квадрат угла

отклонения отличен от нуля. С аналогичным явлением мы встречаемся в обыденной жизни, наблюдая, как закручивается со временем телефонный шнур. При каждом телефонном разговоре шнур закручивается в ту или иную сторону равновероятно. Однако после большого числа разговоров шнур оказывается закрученным на угол, пропорциональный квадратному корню из числа разговоров.

Поскольку разброс электронов пучка по углам представляет собой совокупность большого числа независимых случайных процессов, то распределение по углам имеет вид  $\Phi(\vartheta) = Ae^{-\vartheta^2/\overline{\vartheta^2}}$  (гауссово распределение). Средний квадрат угла отклонения  $\overline{\vartheta^2}$  пропорционален числу столкновений  $N$ , равному отношению толщины образца  $L$  к длине свободного пробега  $l$ . Если  $\overline{\vartheta_1^2}$  — средний квадрат угла отклонения при одном столкновении, то

$$\overline{\vartheta^2} = \overline{\vartheta_1^2} N = \overline{\vartheta_1^2} \frac{L}{l} = n\sigma L \overline{\vartheta_1^2} = \overline{\vartheta^2} L,$$

где  $\sigma$  — сечение рассеяния,  $n$  — число ядер в единице объема, а  $\overline{\vartheta^2}$  — средний квадрат угла отклонения на единице длины пути, т. е.  $\overline{\vartheta^2} = n\sigma \overline{\vartheta_1^2}$ . Так как, по определению,  $\overline{\vartheta_1^2} = \frac{1}{\sigma} \int \sigma(\vartheta) \vartheta^2 d\Omega$ , то  $\overline{\vartheta^2} = n \int \sigma(\vartheta) \vartheta^2 d\Omega$ . Для резерфордского рассеяния получаем

$$\overline{\vartheta^2} \sim 2\pi n \frac{Z^2}{E^2} \ln \frac{\vartheta_{\max}}{\vartheta_{\min}}.$$

Эта формула годится как в релятивистском, так и в нерелятивистском случае.

Рассмотрим два предельных случая:  $Ze^2/\hbar v \gg 1$  и  $Ze^2/\hbar v \ll 1$ . В первом случае рассеяние для всех углов можно считать классическим (см. стр. 40). Максимальный угол рассеяния определяется из условия, что прицельный параметр равен радиусу ядра  $R$ , т. е.  $\vartheta_{\max} \sim V(R)/E = Z/RE$ . Однако в случае рассеяния электронов значение  $E \gg Z/R$  противоречит условию классичности; в обратном случае, который соответствует условию  $Z/RE > 1$ ,  $\vartheta_{\max} \sim 1$ . Минимальный угол отклонения определяется атомными размерами  $a$ :  $\vartheta_{\min} \sim Z/aE$ . Оценивая  $a$  по модели Томаса — Ферми, находим  $\vartheta_{\min} \sim Z/Z^{-1/3} E \sim Z^{2/3}/E$ .

Следовательно, для электронов с  $E < Z/R$

$$\bar{\vartheta}^2 \sim 2\pi n \frac{Z^2}{E^2} \ln \frac{E}{Z^{1/3}}.$$

В случае, когда  $Ze^2/\hbar v \ll 1$ , классический угол отклонения меньше угла квантовомеханической дифракции  $\vartheta_a$ . Поэтому углы  $\vartheta_{\max}$  и  $\vartheta_{\min}$  должны определяться следующим образом:  $\vartheta_{\min}$  — угол дифракции на радиусе атома:

$$\vartheta_{\min} \sim \frac{\lambda}{a} \sim \frac{Z^{1/3}}{\rho},$$

$\vartheta_{\max}$  — угол дифракции на ядре:

$$\vartheta_{\max} \sim \frac{\lambda}{R} \sim \frac{1}{\rho R} \quad \text{при} \quad \frac{\lambda}{R} < 1,$$

$$\vartheta_{\max} \sim 1 \quad \text{при} \quad \frac{\lambda}{R} > 1.$$

Таким образом, в случае  $Ze^2/\hbar v \ll 1$

$$\bar{\vartheta}^2 = 2\pi n \frac{Z^2}{E^2} \times \begin{cases} \ln \frac{a}{R}, & \lambda/R < 1, \\ \ln \frac{a}{\lambda}, & \lambda/R > 1. \end{cases}$$

#### 4. ОЦЕНКИ В КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

##### Нулевые колебания электромагнитного поля

Как известно, энергия электромагнитного поля равна  $\int \left( \frac{\mathcal{E}^2}{8\pi} + \frac{\mathcal{H}^2}{8\pi} \right) d\mathbf{r}$ , где  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{H}$  — напряженности электрического и магнитного полей. Если в пространстве нет зарядов, то электростатический потенциал  $\phi$  можно считать равным нулю. Тогда  $\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ ,  $\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$ , где  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал.

Разложим векторный потенциал по плоским волнам:

$$\mathbf{A} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \text{компл. сопряж.}$$

Тогда для энергии электромагнитного поля  $E$  получаем следующее выражение:

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{1}{8\pi c^2} |\dot{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{k^2}{8\pi} |\mathbf{A}_{\mathbf{k}}|^2 \right\}. \quad (1.33)$$

Здесь нормировочный объем пространства, в котором находится поле, считается равным 1.

Легко видеть отсюда, что энергия электромагнитного поля равна сумме энергий невзаимодействующих гармонических осцилляторов. Действительно, величина  $A_k$  играет здесь роль координаты,  $\dot{A}_k$  — скорости,  $1/4\pi c^2$  — массы гармонического осциллятора. Частота осциллятора  $\omega_k = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$ , где  $\alpha$  — жесткость, а  $m$  — масса. В данном случае  $\alpha = k^2/4\pi$ ,  $m = 1/4\pi c^2$ , следовательно,  $\omega_k = ck$ . Первое слагаемое в выражении (1.33) представляет собой кинетическую энергию электромагнитного поля, а второе — потенциальную.

Итак, электромагнитное поле в пространстве без зарядов можно рассматривать как совокупность независимых гармонических осцилляторов со всеми возможными значениями волнового вектора  $k$ .

Применим к совокупности гармонических осцилляторов законы квантовой механики. Тогда энергия электромагнитного поля равна

$$E = \sum_k \left( n_k + \frac{1}{2} \right) \omega_k,$$

где  $n_k$  — номер возбужденного состояния осциллятора с волновым вектором  $k$  (число квантов с волновым вектором  $k$ ). Для простоты здесь опускается значок  $\lambda$  поляризации кванта. Он определяет направление ориентации вектора  $A_k$ , лежащего в плоскости, перпендикулярной к  $k$ . В основном состоянии все  $n_k = 0$  (нет квантов) и  $E = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k$ . При этом ни кинетическая, ни потенциальная энергии колебаний не имеют определенного значения.

Следовательно, ни напряженность электрического поля, ни напряженность магнитного поля не имеют определенного значения. Средние значения электрического и магнитного полей при этом равны нулю, но средние значения от квадратов этих величин отличны от нуля. Это означает, что электромагнитное поле в пустоте колеблется. Эти колебания называются нулевыми колебаниями электромагнитного поля.



Теперь можно ответить на следующий вопрос: почему атомы не находятся неограниченно долго в возбужденных состояниях? Ведь возбужденные состояния есть точные стационарные состояния уравнения Шредингера. Причина заключается в том, что в пустоте всегда есть электромагнитное поле, с которым взаимодействует атом. В результате состояния атома перестают быть стационарными.

Рассмотрим взаимодействие частицы с электромагнитным полем. Для того чтобы найти изменение гамильтониана при наложении поля, нужно импульс частицы  $p$  заменить на  $p - \frac{e}{c} A$ , где  $A$  — векторный потенциал поля. Следовательно, оператор кинетической энергии  $\frac{p^2}{2m}$  преобразуется в  $\frac{p^2}{2m} - \frac{e}{mc} pA + \frac{e^2}{2mc^2} A^2$ . Последнее слагаемое в этом выражении мало. Его нужно учитывать в задачах, где первый порядок теории возмущений дает нулевой вклад, например, в задаче рассеяния кванта на электроне. Операторы  $A_k$  играют роль координаты соответствующего осциллятора поля и поэтому имеют матричные элементы, соответствующие изменению числа квантов на 1.

Вычислим матричный элемент  $(A_k)_{01}$  перехода из вакуумного состояния в состояние с одним квантом. Для этого найдем величину  $(A_k^2)_{00} = \sum_n (0 | A_k | n) (n | A_k | 0)$ . Так как оператор  $A_k$  рождает один квант (с частотой  $\omega_k$ ), то в сумме отличен от нуля только член с  $n=1$ . Итак,  $|(A_k)_{01}| = \sqrt{(|A_k|^2)_{00}}$ . Для гармонического осциллятора средние значения кинетической и потенциальной энергий совпадают и равны половине полной энергии. Следовательно, для основного состояния  $\bar{T}_k = \bar{U}_k = \frac{1}{2} E_k = \frac{1}{4} ck$ . Так как  $\bar{U}_k = \frac{k^2}{8\pi} (|A_k|^2)_{00}$ , то  $\frac{1}{4} ck = \frac{k^2}{8\pi} (|A_k|^2)_{00}$ , откуда  $(A_k^2)_{00} = \frac{2\pi c}{k}$ . Следовательно,

$$|(A_k)_{01}| = \sqrt{\frac{2\pi c}{k}} = \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega_k}}$$

Аналогично находится матричный элемент от  $A_k$  для перехода из состояния с  $n$  квантами в состояние с  $n+1$  квантами.

Таким образом, матричный элемент перехода частицы из состояния  $\Phi_{\lambda_1}$  в состояние  $\Phi_{\lambda_2}$  с испусканием кванта равен

$$V_{\lambda_1\lambda_2} = \left( -\frac{e\mathbf{p}}{mc} \mathbf{A}_k \right)_{\lambda_1\lambda_2} = -\frac{e}{mc} (\Phi_{\lambda_1} | \mathbf{p} \boldsymbol{\eta}_{k\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | \Phi_{\lambda_2}) \sqrt{\frac{2\pi c^2}{\omega_k}}. \quad (1.34)$$

Чтобы перейти к релятивистскому случаю, достаточно для оценки заменить  $\mathbf{p}/m$  на  $\mathbf{v}$ . Здесь  $\mathbf{p} \boldsymbol{\eta}_{k\lambda}$  — проекция импульса на направление  $\mathbf{A}_k$  ( $\boldsymbol{\eta}_{k\lambda}$  — единичный вектор поляризации кванта).

### Фотоэффект

Рассмотрим фотоэффект: квант света поглощается атомом, в результате чего из атома вылетает электрон. Число переходов за единицу времени равно  $\frac{2\pi}{\hbar} |V_{\lambda_1\lambda_2}|^2 \times \times \delta(E_i - E_f)$ , где  $E_i$  — энергия начального состояния, равная сумме энергий кванта  $\omega_k$  и энергии электрона в начальном состоянии  $\varepsilon_{\lambda_1}$ , а  $E_f = \varepsilon_p$  — энергия вылетевшего электрона. Число переходов электрона за единицу времени в состоянии с импульсами  $\mathbf{p}$  в интервале  $[\mathbf{p}, \mathbf{p} + d\mathbf{p}]$  равно

$$\begin{aligned} dW &= 2\pi \int |V_{12}|^2 \delta(\varepsilon_{\lambda_1} + \omega_k - \varepsilon_{\lambda_2}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} = \\ &= 2\pi \int |V_{12}|^2 \frac{p^2 \frac{d\mathbf{p}}{dE} dE}{(2\pi)^3} \delta(\varepsilon_{\lambda_1} + \omega_k - \varepsilon_{\lambda_2}) d\Omega = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int |V_{12}|^2 \frac{p^2}{v} d\Omega. \end{aligned}$$

Сечение фотоэффекта равно отношению числа переходов за единицу времени к интенсивности потока квантов. Последняя равна скорости кванта  $c$ , так как в нормировочном объеме ( $=1$ ) находится один квант. Следовательно, по порядку величины имеем

$$\sigma \sim \frac{4\pi p}{(2\pi)^2 c} |V_{12}|^2.$$

Покажем, что в выражении (1.34) экспоненту  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  можно заменить единицей. Действительно, волновое число

$k = \omega/c \sim I/c$ , где  $I$  — потенциал ионизации атома;  $I \sim Z^2$  для внутренних электронных оболочек. Радиус этих оболочек  $\sim 1/Z$ , следовательно,  $kr \sim \frac{Z^2}{c} \frac{1}{Z} \sim \frac{Z}{c} \ll 1$  и  $e^{ikr} \approx 1$ . Экспоненту  $e^{ikr}$  тем более можно заменить единицей для наружных оболочек, где  $kr \sim 1/c = 1/137$ .

Так как  $(\varphi_{\lambda_1} \mathbf{r} \varphi_{\lambda_2}) = (\varphi_{\lambda_1} \mathbf{r} \varphi_{\lambda_2}) = i(\varepsilon_{\lambda_1} - \varepsilon_{\lambda_2})(\varphi_{\lambda_1} \mathbf{r} \varphi_{\lambda_2}) = i\omega(\varphi_{\lambda_1} \mathbf{r} \varphi_{\lambda_2})$ , то сечение фотоэффекта имеет порядок величины

$$\sigma \sim \frac{\rho}{c} \omega^2 |(\varphi_0 \mathbf{r} \varphi_p)|^2 \frac{1}{\omega} \sim \frac{\rho\omega}{c} |(\varphi_0 \mathbf{r} \varphi_p)|^2.$$

Рассмотрим фотоионизацию  $K$ -оболочки в двух предельных случаях, когда энергия вылетающего электрона много меньше потенциала ионизации и когда она много больше потенциала ионизации. В первом случае энергия кванта близка к энергии ионизации  $I \sim Z^2$ , т. е.

$$\sigma \sim \frac{\rho Z^2}{c} |(\varphi_0 \mathbf{r} \varphi_p)|^2.$$

Возле порога реакции это сечение содержит множитель  $p \sim \sqrt{E}$ . Если бы матричный элемент  $r_{0p}$  не зависел от энергии, то  $\sigma \sim \sqrt{E}$ . Это — обычный результат для сечения реакций вблизи порога. Зависимость сечения  $\sim \sqrt{E}$  возникла из-за статистического веса конечных состояний:

$$\int \delta(E - \omega) \frac{dp}{(2\pi)^3} \sim \int \delta(E - \omega) p^2 dp \sim \int \delta(E - \omega) p dE \sim p.$$

В случае водородоподобного атома дело обстоит иначе: сечение фотоэффекта при малых энергиях вылетающего электрона не зависит от энергии. Это связано с тем, что дипольный матричный элемент из-за корневой особенности кулоновских волновых функций при  $r^2 = 0$  (см. стр. 26) ведет себя как  $1/\sqrt{p}$  вблизи порога реакции. Оценим  $r_{0p}$  вблизи порога.

Волновая функция  $K$ -электрона  $\varphi_0 \sim e^{-Zr}$ , и, следовательно, в дипольном матричном элементе существенны малые расстояния  $r \sim 1/Z$ . Для вылетевшего электрона волновая функция на большом расстоянии от ядра имеет вид плоской волны

$$\varphi_p = e^{ipr}. \quad (1.35)$$

Таким образом, чтобы оценить  $r_{0p}$ , нужно найти  $\varphi_p$  при  $r \sim 1/Z$ . Для этого напишем уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции  $u_p/r$ :  $u_p'' + k^2 u_p = 0$ , где  $k^2 = 2(E + Z/r)$ . В 1.1 мы получили следующее приближенное решение этого уравнения (так называемое квазиклассическое решение):

$$u_p = \frac{A}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_{r_1}^r k dr - \frac{\pi}{4}\right), \quad k = \sqrt{2(E + Z/r)}. \quad (1.36)$$

Здесь  $E$  — энергия вылетающего электрона на бесконечности, т. е. очень маленькая величина. Условия применимости (1.36):  $\frac{d\lambda}{dr} \ll 1$  (см. 1.1 и 3.1); отсюда получаем:  $\frac{d\lambda}{dr} \sim \sim 1/\sqrt{Zr}$ , и условие квазиклассичности движения имеет вид  $Zr > 1$ , т. е.  $r > 1/Z$ . Итак, условие квазиклассичности движения выполняется вплоть до  $K$ -оболочки атома.

Оценим нормировочный множитель  $A$ . Для этого рассмотрим  $u_p$  на больших расстояниях  $r$ :

$$u_p \approx \frac{A}{\sqrt{2E}} \cos(pr + \alpha). \quad (1.37)$$

С другой стороны, при  $r \rightarrow \infty$  волновая функция  $u_p/r$  должна совпадать с радиальной частью первой гармоники (оператор  $r$  меняет момент на 1) разложения плоской волны  $e^{ipr \cos \theta}$  по полиномам Лежандра:  $e^{ipr \cos \theta} = \sum_l f_l P_l(\cos \theta)$ , амплитуда которой  $\sim 1/pr$ . Следовательно, из (1.36) находим:  $A/\sqrt{p} \sim 1/p$ , откуда  $A \sim 1/\sqrt{p}$ . Итак, волновая функция вылетевшего электрона  $\varphi_p$  при  $r \sim 1/Z$  имеет оценку  $\frac{1/\sqrt{p}}{r \sqrt{Z/r}} \sim \frac{\sqrt{Z}}{\sqrt{p}}$ .

Дипольный матричный элемент  $(\varphi_0 r \varphi_p)$  имеет порядок

$$(\varphi_0 r \varphi_p) \sim Z^{3/2} \int_0^\infty e^{-Zr} \frac{\sqrt{Z}}{\sqrt{p}} r^2 dr \sim \frac{Z^2}{Z^4 \sqrt{p}} \sim \frac{1}{Z^2 \sqrt{p}}.$$

Так как квадрат дипольного матричного элемента обратно пропорционален корню из энергии вылетающего электрона  $E$ , то сечение фотоэффекта  $\sigma$  не зависит от энергии  $E$ .

Итак, при  $E - I \ll I$  полное сечение фотоэффекта

$$\sigma \sim \frac{\rho Z^2}{c} \left( \frac{1}{Z^2} \right)^2 \frac{1}{\rho},$$

или

$$\sigma = \frac{C_1}{cZ^2}. \quad (1.38)$$

Рассмотрим другой предельный случай, когда энергия вылетающего электрона много больше потенциала ионизации. Оценим дипольный матричный элемент и сечение фотоэффекта. Волновая функция непрерывного спектра имеет вид  $\varphi_p = F e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}$ , где  $F$  — функция, стремящаяся к единице при  $r \rightarrow \infty$ . В матричном элементе  $(\varphi_0 \mathbf{p} \varphi_0)$ , как мы увидим, существенны расстояния  $r \sim 1/p$ . Отклонение  $F$  от единицы определяется величиной  $V(r)/E$ . При  $r \sim 1/p$  можно полагать  $F \approx 1$ . Тогда в интеграле  $(\varphi_0 \mathbf{p} \varphi_p)$  оператор  $\mathbf{p}$  можно вынести из-под знака интеграла, заменив его числом  $p$ . Учет поляризации квантов внесет лишь множитель порядка 1. Следовательно,

$$\sigma \sim \frac{p}{c} |(\varphi_0 \mathbf{p} \varphi_p)|^2 \sim \frac{p^2}{c} |(\varphi_0 e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}})|^2.$$

Интегрируя по углам, получаем

$$(\varphi_0 e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}) \sim Z^{3/2} \int_0^\infty e^{-Zr} \frac{\sin pr}{pr} r^2 dr = \frac{Z^{3/2}}{2p} \int_{-\infty}^\infty r e^{-Z|r|} \sin pr dr.$$

Оценим это выражение. Легко видеть, что вторая производная от функции  $f(r) = r e^{-Z|r|}$  имеет скачок при  $r = 0$ . Поэтому далекие фурье-компоненты этой функции имеют оценку (см. 1.1)  $\sim Z/p^3$ .

Если бы потенциал  $V$  как функция  $r^2$  не имел особых точек на вещественной оси, то волновая функция как скаляр была бы аналитической функцией  $r^2$ . В этом случае далекая фурье-компонента волновой функции как функция энергии была бы экспоненциально мала (см. 1.1). Мы видим, что степенная зависимость матричного элемента от энергии в нашем случае возникает из-за того, что  $\Psi$  в кулоновском потенциале как функция  $r^2$  имеет точку ветвления при  $r^2 = 0$ . Это связано с тем, что кулоновский потенциал  $1/r$  имеет

особенность при  $r = 0$ . Полюсная особенность кулоновского потенциала привела к корневой особенности в решении уравнения Шредингера.

Итак, матричный элемент  $(\varphi_0 e^{ipr})$  при  $p \rightarrow \infty$  имеет оценку  $Z^{5/2}/p^4$ , а сечение фотоэффекта

$$\sigma \sim \frac{Z^5 p}{c p^8}, \text{ т. е. } \sigma = \frac{C_2 Z^5}{c E^{7/2}}, \quad \text{или} \quad \sigma = \frac{2^{7/2} C_2}{c Z^2} \left( \frac{I}{E} \right)^{7/2}. \quad (1.39)$$

Здесь  $I$  — потенциал ионизации  $K$ -электрона, равный  $Z^2/2$ . Численный расчет показывает, что  $C_2 \sim 10$ .

Если положить в (1.39) энергию кванта  $E$  равной потенциалу ионизации  $I$ , то мы должны получить по порядку величины формулу (1.38). Однако, как показывают численные расчеты, формула (1.39) дает при  $E = I$  сечение, на порядок большее, чем (1.38). Это означает, что переход от области  $E - I \ll I$  к области  $E \gg I$  оказывается сильно растянутым.

### Времена жизни возбужденных состояний атома

а) Оценим время жизни состояния  $2p$  водородоподобного атома. Электрон из состояния  $2p$  переходит в состояние  $1s$ , испуская дипольный  $\gamma$ -квант. Число переходов в единицу времени (обратное время жизни) равно

$$W_{01} = 2\pi \int |V_{01}|^2 \frac{dk}{(2\pi)^3} \delta(E_0 - E_1 - \omega),$$

где  $V = -\frac{1}{c} \mathbf{p} \mathbf{A}$  — потенциал взаимодействия электрона с электромагнитным полем. Индекс 0 соответствует состоянию  $1s$ , индекс 1 — состоянию  $2p$ ,  $\omega$  — энергия  $\gamma$ -кванта. Так как

$$d\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega = k^2 \frac{dk}{d\omega} d\Omega d\omega,$$

то

$$W_{01} = 2\pi \int |V_{01}|^2 \frac{k^2 \frac{dk}{d\omega} d\Omega}{(2\pi)^3}.$$

Оценим матричный элемент перехода  $V_{01}$ ; учитывая нормировку потенциала  $\mathbf{A}$  электромагнитного поля (см. стр. 49),

находим

$$V_{01} = -\frac{1}{c} (\mathbf{pA})_{01} \sim \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} P_{01}.$$

Здесь мы не интересуемся поляризацией  $\gamma$ -кванта, которая внесет лишь численные множители. Оценим матричный элемент импульса  $p$ :

$$p_{01} = i\omega r_{01} \sim \frac{\omega}{Z}.$$

Следовательно,

$$W_{01} \sim \frac{\omega^2}{Z^2} \frac{1}{\omega} k^2 \frac{dk}{d\omega} \sim \frac{\omega^3}{Z^2 c^3}.$$

Так как частота перехода  $\omega$  имеет порядок  $Z^2$ , то окончательно находим

$$W_{01} \sim \frac{Z^4}{c^3}.$$

Оценим численно время жизни состояния относительно дипольного перехода. Атомное время жизни имеет порядок

$$\tau_{ат} \sim \frac{\hbar}{E_{ат}} \sim \frac{10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}}{27 \text{ эв} \cdot 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг/эв}} = 0,3 \cdot 10^{-16} \text{ сек}.$$

Следовательно,  $\tau_{дип} \sim \frac{c^3}{Z^4} \tau_{ат}$ . Для атома водорода  $\tau_{дип} \sim 10^7 \cdot 10^{-17} = 10^{-10}$  сек. Точный расчет дает несколько большие значения  $\tau_{дип}$ .

б) Оценим время жизни квадрупольных переходов, например,  $3d \rightarrow 1s$ . Ранее в операторе  $\mathbf{A}$  электромагнитного поля мы заменяли множитель  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  ( $\mathbf{k}$  — волновой вектор кванта) единицей ( $k r = \frac{\omega}{c} r \sim \frac{Z}{c} \ll 1$ ). При рассмотрении квадрупольных переходов нужно разложить  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  в ряд, причем главный вклад внесет член разложения  $i\mathbf{k}\mathbf{r}$ . Получаем

$$V_{01} = i \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} ((\boldsymbol{\eta}\mathbf{p})(\mathbf{k}\mathbf{r}))_{01},$$

где  $\boldsymbol{\eta}$  — поляризация кванта.

Направим ось  $z$  по вектору  $\boldsymbol{\eta}$ , а ось  $x$  — по  $\mathbf{k}$  (вектор поляризации кванта  $\boldsymbol{\eta}$  перпендикулярен к волновому

вектору  $\mathbf{k}$ ). Тогда

$$\begin{aligned} V_{01} &= ik \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} (p_z x)_{01} = \\ &= ik \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \left[ \frac{1}{2} (p_z x - p_x z) + \frac{1}{2} (p_z x + p_x z) \right]_{01} = \\ &= ik \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \left[ -\frac{1}{2} [rp]_y + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (zx) \right]_{01}. \end{aligned}$$

Первое слагаемое в этом выражении представляет собой матричный элемент от  $y$ -проекции момента количества движения, т. е. соответствует дипольному магнитному переходу. Произведение  $zx$ —это компонента квадрупольного момента, т. е. второе слагаемое определяет вероятность квадрупольного электрического перехода. Оба слагаемых имеют одинаковый порядок величины.

Оценим численно время жизни состояния относительно квадрупольного перехода. В отличие от дипольных переходов, в матричный элемент добавляется множитель  $kr$ . Следовательно,

$$\tau_{\text{квад}} \sim \tau_{\text{дип}} \frac{1}{(kr)^2} \sim \tau_{\text{дип}} \frac{c^2}{Z^2}.$$

Для атома водорода  $\tau_{\text{квад}} \sim 10^{-10} \cdot 10^4 \sim 10^{-6}$  сек.

**Задача.** Оценить время жизни водородоподобного атома по отношению к испусканию двух квантов.

**Ответ.**  $\tau \sim c^6/Z^6$ .

### Тормозное излучение

Оценим эффективное сечение излучения  $\gamma$ -квантов при рассеянии электронов на ядре. Предположим, что частота  $\gamma$ -квантов много меньше энергии электрона. Тогда излучение слабо влияет на движение электрона и эффективное сечение приближенно равно произведению сечения рассеяния электрона на вероятность испускания  $\gamma$ -кванта.

Оценим вероятность испускания фотона при заданном движении электрона. Уравнение Шредингера для фотона в энергетическом представлении имеет вид

$$i\dot{C}_n = \sum_{n'} V_{nn'} C_{n'} e^{i(\omega_n - \omega_{n'})t}, \quad (1.40)$$



где  $V$  описывает взаимодействие электрона с электромагнитным полем, а  $C_n$  — амплитуда состояния с  $n$  квантами с заданными волновым вектором и поляризацией.

В основном состоянии  $C_0=1$ , а все  $C_{n \neq 0}=0$ . В первом порядке теории возмущений отлична от нуля амплитуда перехода в состояние с одним квантом,  $C_1$ . Из (1.40) получаем

$$i\dot{C}_1 = V_{10} e^{i\omega t},$$

откуда

$$C_1 = -i \int_{-\infty}^{\infty} V_{10} e^{i\omega t} dt = +i \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{c} \mathbf{v} \mathbf{A} \right)_{10} e^{i\omega t} dt.$$

Мы написали взаимодействие с излучением для бесспиновых частиц. Для частиц со спином взаимодействие усложняется, но по порядку величины может быть оценено по этой же формуле.

Поскольку излучение не влияет на рассеяние электрона, то скорость  $\mathbf{v}$  можно считать заданной функцией времени.

Следовательно, так как  $\mathbf{A} \sim \boldsymbol{\eta} e^{-ikr} \approx \boldsymbol{\eta} e^{-i\omega \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c} t}$ , то

$$C_1 = i \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathbf{v} \boldsymbol{\eta}) e^{i\omega t - i\omega \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c} t} dt, \quad (1.41)$$

где  $\boldsymbol{\eta}$  — единичный вектор поляризации кванта,  $\mathbf{n}$  — единичный вектор  $\frac{\mathbf{k}}{k}$ .

Так как время соударения электрона много меньше, чем интервал  $t$ , существенный в этом интеграле,  $t \sim \frac{1}{\omega \left(1 - \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c}\right)}$ ,

то можно считать, что скорость частицы в момент времени  $t=0$  скачкообразно изменилась с  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1$  на  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_2$ . Тогда из (1.41) находим

$$\begin{aligned} C_1 &= i \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} \left\{ (\mathbf{v} \boldsymbol{\eta}) \frac{e^{i\omega \left(t - \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c} t\right)}}{i\omega \left(1 - \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c}\right)} \Big|_{-\infty}^0 + (\mathbf{v} \boldsymbol{\eta}) \frac{e^{i\omega \left(t - \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c} t\right)}}{i\omega \left(1 - \frac{\mathbf{v} \mathbf{n}}{c}\right)} \Big|_0^{\infty} \right\} = \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\omega^3}} \boldsymbol{\eta} \left( \frac{\mathbf{v}_1}{1 - \frac{\mathbf{v}_1 \mathbf{n}}{c}} - \frac{\mathbf{v}_2}{1 - \frac{\mathbf{v}_2 \mathbf{n}}{c}} \right). \quad (1.42) \end{aligned}$$

Для малых углов отклонения электрона и кванта из (1.42) получаем

$$C_1^2 \sim \frac{1}{\omega^3} \frac{(\Delta v)^2}{(1-v/c)^2}; \quad (1.43)$$

здесь  $\Delta v$  — изменение скорости электрона. Так как знаменатели выражения (1.42) при малых углах отклонения кванта  $\vartheta_k$  и электрона  $\vartheta_e$  имеют вид

$$1 - \frac{v}{c} + \frac{(\vartheta_k + \vartheta_e)^2}{2}, \quad 1 - \frac{v}{c} + \frac{\vartheta_k^2}{2},$$

то существенные углы отклонения ограничены условием

$$\vartheta_k, \vartheta_e \leq \sqrt{1 - \frac{v}{c}}. \quad (1.44)$$

Оценим вероятность испускания кванта в интервал частот  $[\omega, \omega + d\omega]$  при заданном изменении скорости электрона  $\Delta v$ . Для этого умножим (1.43) на статистический вес конечных состояний кванта  $dk/(2\pi)^3$ :

$$dW \sim \frac{1}{\omega^3} \frac{(\Delta v)^2}{\left(1 - \frac{v}{c}\right)^2} k^2 dk d\Omega_k \sim \frac{(\Delta v)^2}{c^3 \left(1 - \frac{v}{c}\right)^2} \frac{d\omega}{\omega} \vartheta_k d\vartheta_k. \quad (1.45)$$

Сечение тормозного излучения равно произведению вероятности испускания кванта  $dW$  на сечение кулоновского рассеяния для релятивистских электронов:

$$d\sigma_{т.и} \sim \frac{(\Delta v)^2 \vartheta_k^2}{c^3 \left(1 - \frac{v}{c}\right)^2} \frac{d\omega}{\omega} \cdot \frac{Z^2}{E^2} \frac{d\Omega_e}{\sin^4 \frac{\theta_e}{2}}$$

или при малых углах рассеяния ( $\sin \theta_e \approx \theta_e \approx q/p$ )

$$d\sigma_{т.и} \sim \frac{q^2 \left(1 - \frac{v}{c}\right)}{c^3 \left(1 - \frac{v}{c}\right)} \frac{d\omega}{\omega} \cdot \frac{Z^2}{p^2 c^2} \frac{\theta_e d\theta_e}{\theta_e^4} \sim \frac{Z^2}{c^5} \frac{d\omega}{\omega} \frac{dq}{q}. \quad (1.46)$$

Найдем вероятность испускания кванта для произвольного изменения импульса электрона. Для этого проинтегрируем (1.46) по  $q$ . Будем считать электрон ультрарелятивистским, т. е.  $1 - v/c \ll 1$ . Так как  $Ze^2/\hbar c \ll 1$ , то минимальный угол отклонения будет определяться дифракцией

электрона на радиусе атома  $a \sim Z^{-1/3}$ , а максимальный — условием (1.44).

Интегрируя (1.46) по  $q$ , получаем

$$\int \frac{d\sigma_{т.и}}{dq} dq \sim \frac{Z^2}{c^5} \frac{d\omega}{\omega} \ln \frac{q_{\max}}{q_{\min}} \sim \frac{Z^2}{c^5} \frac{d\omega}{\omega} \ln \frac{c}{Z^{1/3}}. \quad (1.47)$$

Оценим сечение тормозного излучения квантов с произвольными частотами. Интегрируя (1.47) по  $\omega$ , находим

$$\sigma_{т.и} \sim \frac{Z^2}{c^5} \ln \frac{c}{Z^{1/3}} \cdot \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}. \quad (1.48)$$

Максимальная частота кванта — порядка энергии электрона:

$$\omega_{\max} \sim \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}.$$

При  $\omega_{\min} \rightarrow 0$  выражение (1.48) расходится (см. стр. 109). Однако потери энергии электрона на тормозное излучение будут конечными:  $-\frac{dE}{dx} = \int N\omega d\sigma_{т.и}$ , где  $N$  — число ядер в единице объема. Окончательно,

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{Z^2 N}{c^5} E \ln \frac{c}{Z^{1/3}}.$$

## Образование пар

Напомним читателю, что релятивистски инвариантное уравнение движения электрона — уравнение Дирака — при заданном импульсе  $p$  электрона имеет собственные функции, отвечающие не только положительным, но и отрицательным значениям энергии:  $E = \pm \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ . Для того чтобы объяснить, почему электрон не переходит в отрицательные состояния с испусканием кванта, Дирак предположил, что все отрицательные состояния в вакууме заполнены электронами. Тогда переход в эти состояния запрещен принципом Паули. Незаполненное отрицательное состояние означает, что в вакууме есть позитрон.

С этой точки зрения механизм образования пар аналогичен механизму фотоэффекта: квант переводит электрон из состояния с отрицательной энергией в состояние с положительной энергией. В пустоте такой процесс невозможен,

как это сразу видно из законов сохранения энергии и импульса. В поле ядра процесс делается возможным, так как электрон передает излишек импульса ядру.

Можно оценить сечение образования пар на ядре аналогично тому, как это делалось для тормозного излучения: найти вероятность образования пар при заданной величине передаваемого ядру импульса, а затем умножить эту вероятность на сечение рассеяния электрона на ядре и проинтегрировать по всем значениям передаваемого импульса.

Можно получить сечение образования пар, рассматривая этот процесс как обратный тормозному излучению. Строго говоря, процесс, обратный тормозному излучению, соответствует поглощению кванта и переходу электрона из одного состояния с положительной энергией в другое. Однако в ультрарелятивистском случае, которым мы для простоты ограничимся, собственные функции, соответствующие отрицательной энергии (т. е. соответствующие позитрону), мало отличаются от функций для положительной энергии (кулоновское поле ядра вносит малую поправку). Следовательно, сечение образования пар можно приближенно рассматривать как процесс, обратный тормозному излучению.

Сечения прямого и обратного процессов относятся как статистические веса конечных состояний. В случае тормозного излучения в конечном состоянии есть электрон и квант, тогда как в случае образования пар — позитрон и электрон. Но при больших энергиях статистический вес кванта не отличается от статистического веса электрона той же энергии, и поэтому сечение образования пар совпадает по порядку величины с сечением тормозного излучения, проинтегрированным по энергиям квантов порядка энергии электрона. Таким образом,

$$\sigma_{\text{пар}} \sim \frac{Z^2}{c^5} \ln \frac{c}{Z^{1/3}}.$$

Потери энергии квантов на единице пути вследствие образования пар имеют порядок

$$-\frac{dE}{dx} \sim \frac{NZ^2}{c^5} E \ln \frac{c}{Z^{1/3}},$$

т. е. совпадают по порядку величины с потерями энергии ультрарелятивистского электрона на тормозное излучение.

### Лэмбовское смещение

Электрон атома, взаимодействуя с нулевыми колебаниями электромагнитного поля, дрожит на своей орбите. Вследствие этого его заряд размазывается в пространстве и взаимодействие с кулоновским полем ядра ослабевает. Таким образом, уровни энергии из-за взаимодействия с нулевыми колебаниями повышаются. Это явление называется лэмбовским смещением. Оценим величину смещения.

Пусть  $\delta$  — отклонение электрона от равновесного положения из-за взаимодействия с нулевыми колебаниями. Тогда изменение потенциала взаимодействия равно

$$H' = V(\mathbf{r} + \delta) - V(\mathbf{r}) = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \delta_i \delta_j \quad (i, j = x, y, z),$$

Здесь  $\mathbf{r}$  — координата электрона относительно ядра. Усредним это выражение по дрожанию электрона. Тогда  $\overline{\delta} = 0$ , а  $\overline{\delta_x^2} = \overline{\delta_y^2} = \overline{\delta_z^2} = \frac{1}{3} \overline{\delta^2}$ . Следовательно,

$$H' = \frac{1}{6} \overline{\delta^2} \Delta V.$$

Итак, для определения величины лэмбовского смещения необходимо знать средний квадрат амплитуды дрожания электрона  $\overline{\delta^2}$ .

Уравнение движения электрона в поле нулевых колебаний  $\mathbf{E}$  для оценок можно записать в виде

$$-\ddot{\delta} = +E + \omega_{\text{ат}}^2 \delta,$$

где  $\omega_{\text{ат}}$  — частота обращения электрона. Предположим, что частота дрожания электрона много больше  $\omega_{\text{ат}}$ . Тогда членом  $\omega_{\text{ат}}^2 \delta$  в этом выражении можно пренебречь.

Разложим в ряд Фурье отклонение электрона  $\delta$  и поле нулевых колебаний  $E$ :

$$\delta = \sum_{k\lambda} \delta_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t}, \quad E = \sum_{k\lambda} E_{k\lambda} e^{-i\omega_{k\lambda} t}.$$

При этом мы предположили, что  $k\delta \ll 1$ . Ниже мы в этом убедимся.

Уравнение движения электрона в фурье-представлении приобретает вид

$$\omega_{k\lambda}^2 \delta_{k\lambda} = E_{k\lambda}.$$

Средний квадрат амплитуды дрожания  $\overline{\delta^2}$  равен

$$\overline{\delta^2} = \sum_{k\lambda} \overline{\delta_{k\lambda}^2} = \sum_{k\lambda} \frac{E_{k\lambda}^2}{\omega_{k\lambda}^4}.$$

Найдем  $E_{k\lambda}^2$ . Энергия нулевых колебаний типа  $k\lambda$  равна

$$\mathcal{E}_{k\lambda} = \int \frac{E_{k\lambda}^2}{4\pi} dV = \frac{E_{k\lambda}^2}{4\pi} = \frac{1}{2} \omega_{k\lambda}$$

(нормировочный объем равен 1). Отсюда  $E_{k\lambda}^2 = 2\pi\omega_{k\lambda}$ ; следовательно,

$$\overline{\delta^2} = 2\pi \sum_{k\lambda} \frac{1}{\omega_{k\lambda}^3}.$$

Заменим суммирование по  $k$  интегрированием:

$$\sum_{k\lambda} = 2 \int \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{\omega^2 d\omega}{c^3}$$

(множитель 2 возникает из суммы по двум поляризациям кванта). Тогда получаем

$$\overline{\delta^2} = \frac{2}{\pi c^3} \int \frac{d\omega}{\omega} = \frac{2}{\pi c^3} \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}}.$$

Каковы пределы интегрирования в этом выражении?  $\omega_{\max}$  определяется условием нерелятивистского движения электрона в поле нулевых колебаний. Действительно, если электрон при дрожании приобретает релятивистский импульс, то в уравнение движения войдет релятивистская масса и  $\delta_{k\lambda}$  будет уменьшена. Поэтому интеграл обрезается условием  $k \ll c$ ,  $\omega \ll c^2$ . При этом величина  $k\delta$ , которой мы пренебрегли,  $k\delta \sim c^{-1} \omega \ll 1$ .

$\omega_{\min}$  определяется из того условия, что, как мы предположили, частота поля должна быть не меньше, чем частота обращения электрона на атомной орбите  $\omega_{\text{ат}}$ . Как легко видеть из уравнения для  $\delta$ , область  $\omega < \omega_{\text{ат}}$  вносит малый вклад. Итак,  $\overline{\delta^2} = \frac{2}{\pi c^3} \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\text{ат}}}$ . Так как  $\overline{\delta^2}$  логарифми-

чески зависит от  $\omega_{\min}$  и  $\omega_{\max}$ , то неточность в их определении не существенна.

Смещение электронного терма в первом порядке теории возмущений дается диагональным матричным элементом возмущения  $H'$  по состоянию электрона  $\Psi_n$ , т. е.

$$\delta E = \frac{1}{6} \bar{\delta}^2 \int \Psi_n \Delta V \Psi_n dr = \frac{1}{6} \bar{\delta}^2 \int \Psi_n 4\pi\rho \Psi_n dr,$$

где  $\rho$  — плотность заряда. Так как заряд ядра сосредоточен в области, малой по сравнению с радиусом электронной орбиты, то электронную волновую функцию можно взять в начале координат. Интеграл  $\int \rho dr$  равен заряду ядра  $Z$ . Итак,

$$\delta E = \frac{2\pi Z}{3} \bar{\delta}^2 |\Psi_n(0)|^2 = \frac{4Z}{3c^3} |\Psi_n(0)|^2 \ln \frac{\omega_{\max}}{\omega_{\min}},$$

т. е. лэмбовское смещение определяется значением волновой функции электрона в начале координат.

Таким образом, смещение имеет заметную величину лишь для  $s$ -электронов, так как только для них отсутствует центробежный барьер и электрон может находиться в начале координат. Смещение электронных термов, обладающих угловым моментом, будет значительно меньшим.

Лэмбовское смещение приводит к расщеплению термов  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$  водородоподобного атома. Согласно сказанному выше уровень  $2p_{1/2}$  смещается значительно слабее, чем  $2s_{1/2}$ . Так как  $|\Psi_{2s}(0)|^2 = Z^3/8\pi$ , то  $\delta E = \frac{4Z}{3c^3} \frac{Z^3}{8\pi} \ln \frac{c^2}{Z^2} = \frac{Z^4}{6\pi c^3} \ln \frac{c^2}{Z^2}$ .

### Расходимость рядов в квантовой электродинамике

В квантовой электродинамике используют теорию возмущений по электромагнитному взаимодействию. Действительно, ряды теории возмущений содержат безразмерный малый параметр  $e^2/\hbar c \approx 1/137$ .

Покажем, что эти ряды асимптотические, т. е. расходятся при увеличении числа членов. Существует оптимальное число членов ряда, которое лучше всего изображает изучаемый процесс. Ниже это число будет оценено.

Для этого прежде всего убедимся, что физические величины как функции  $e^2$  имеют особую точку при  $e^2 = 0$  и, следовательно, не могут быть разложены в ряд по степеням  $e^2$ .

В качестве примера рассмотрим энергию вакуума (Дайсон, 1952). Если бы не было особой точки при  $e^2 = 0$ , то энергия вакуума не зависела бы от способа стремления  $e^2$  к нулю. Пусть энергия вакуума, найденная по теории возмущений, стремится к  $E_0$ . К какой величине стремится энергия вакуума, когда  $e^2 \rightarrow 0$  со стороны отрицательных значений? Рассмотрим при  $e^2 < 0$  рождение в вакууме  $N$  электронно-позитронных пар. При  $e^2 < 0$  электроны (так же как и позитроны) притягиваются друг к другу. Определим, при каком  $N$  процесс образования пар энергетически выгоден. Пусть электронное и позитронное облака разошлись на достаточно большое расстояние друг от друга, так что отталкиванием между ними можно пренебречь. Энергию каждого из этих облаков можно оценить по методу Томаса — Ферми. Находим, что выигрыш в энергии —  $E \sim N^{7/3}$ . Проигрыш в энергии составляет  $2mc^2$  на каждую электронно-позитронную пару, а для всех частиц  $2mc^2N$ . Следовательно, если  $N^{7/3} > c^2N$ , т. е. если  $N > c^{3/2}$ , то рождение электронно-позитронных пар оказывается выгодным.

При  $N \sim c^{3/2}$  величина  $\varphi \sim c^2$ , поэтому нужно рассмотреть, какой результат получится в релятивистском случае. Рассмотрим для простоты ультрарелятивистский предел. В этом случае  $\rho_0 \sim \varphi/c$ , следовательно (стр. 36),  $\frac{\Phi}{l^2} \sim \left(\frac{\varphi}{c}\right)^3$ , откуда  $\varphi l \sim c^{3/2}$ . Так как  $N \sim \frac{\Phi}{l^2} l^3$ , то получаем  $N \sim \varphi l \sim c^{3/2}$ , т. е. ту же оценку, что и в нерелятивистском случае. Энергия системы при этом —  $E \sim N\varphi \sim c^3/l$ , т. е. может быть неограниченно понижена уменьшением  $l$ . Мы получили, что электромагнитный вакуум при  $e^2 < 0$  оказывается неустойчивым. Так как при  $e^2 > 0$  он устойчив, то это означает, что имеется особая точка при  $e^2 = 0$ .

Рождение  $N$  электронно-позитронных пар соответствует  $N$ -му порядку теории возмущений. Найденное число  $N \sim c^{3/2}$  указывает порядок числа членов теории возмущений, начиная с которого будет сказываться особая точка при  $e^2 = 0$ . Учет более высоких порядков теории возмущений не улучшит, а ухудшит результат.



## РАЗЛИЧНЫЕ СЛУЧАИ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Размерные и модельные оценки — это первый этап решения физической задачи. Затем встает вопрос о количественном подходе. Уравнение Шредингера решается точно лишь для очень малого круга задач. Наиболее распространенным методом для его приближенного решения является теория возмущений. Она применима, когда в физической задаче есть малый параметр. Решение уравнения Шредингера ищется в виде ряда по степеням этого параметра. Ниже рассматриваются различные случаи теории возмущений, причем в каждом случае теория иллюстрируется физическими примерами.

### 1. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ. РАССЕЯНИЕ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ЯДРАХ

Рассмотрим задачу рассеяния в случае, когда к рассеивающему потенциалу добавляется малый возмущающий потенциал. Найдем изменение амплитуды рассеяния по теории возмущений. В качестве примера изучим рассеяние заряженных частиц на атомных ядрах и вычислим добавку к амплитуде кулоновского рассеяния из-за конечности ядра.

Пусть гамильтониан системы равен

$$H = H_0 + H',$$

где  $H'$  — малая добавка, причем известно решение задачи с гамильтонианом  $H_0$ :

$$H_0 \varphi_p = E_p \varphi_p.$$

Граничные условия, налагаемые на  $\varphi_p$  в случае задачи рассеяния (непрерывный спектр), могут быть двух типов:

$$\varphi_p^\pm \rightarrow e^{ipr} + \frac{f^\pm}{r} e^{\pm ipr}.$$

Из них физический смысл имеют лишь функции  $\varphi_p^+$ , соответствующие расходящейся сферической волне, однако для

вспомогательных целей бывают удобны и  $\varphi_p^-$ . Каждая из систем функций  $\varphi_p^+$  или  $\varphi_p^-$  является полной ортогональной системой, т. е.

$$\int \varphi_p^{+*} \varphi_{p'}^+ dr = \int \varphi_p^{-*} \varphi_{p'}^- dr = (2\pi)^3 \delta(p - p').$$

Требуется найти решение уравнения Шредингера

$$H\Psi_p = E_p \Psi_p,$$

или

$$(H_0 - E_p) \Psi_p = -H' \Psi_p. \quad (2.1)$$

Решение уравнения (2.1) будем искать в виде суммы решения невозмущенной задачи  $(H_0 - E_p) \Psi_p = 0$ , т. е.  $\varphi_p^+$ , и добавки, которую удобно разложить по собственным функциям  $\varphi_p^-$  невозмущенной задачи, т. е.

$$\Psi_p = \varphi_p^+ + \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} C_{pp'} \varphi_{p'}^- \quad (2.2)$$

(можно было бы сделать разложение и по  $\varphi_p^+$ , но мы увидим далее, что разложение по функциям  $\varphi_p^-$  удобнее).

Для того чтобы описывать рассеяние,  $\Psi_p$  должна удовлетворять граничному условию

$$\Psi_p \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ipr} + \frac{f_0}{r} e^{ipr}. \quad (2.3)$$

Функция  $\varphi_p^+$  удовлетворяет этому условию:

$$\varphi_p^+ \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ipr} + \frac{f_0}{r} e^{ipr}$$

( $f_0$  — амплитуда рассеяния невозмущенной задачи). Поэтому должно быть

$$\int \frac{dp'}{(2\pi)^3} C_{pp'} \varphi_{p'}^- \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{f_1}{r} e^{ipr}.$$

Определим  $C_{pp'}$ . Умножим (2.1) слева на  $\varphi_{p'}^{-*}$ . Учтывая  $H_0 \varphi_{p'}^- = E_{p'} \varphi_{p'}^-$  и интегрируя по  $r$ , получаем

$$(E_{p'} - E_p) \int \varphi_{p'}^{-*} \Psi_p dr = - \int \varphi_{p'}^{-*} H' \Psi_p dr$$

или, сокращенно,

$$(E_{p'} - E_p) (\varphi_{p'}^- | \Psi_p) = - (\varphi_{p'}^- | H' | \Psi_p). \quad (2.4)$$

При  $|p| \neq |p'|$  согласно (2.2) получаем

$$\begin{aligned} (\Phi_{p'}^- | \Psi_p) &= (\Phi_{p'}^- | \Phi_p^+) + \int \frac{dp''}{(2\pi)^3} C_{pp''} (\Phi_{p'}^- | \Phi_{p''}^-) = \\ &= \int \frac{dp''}{(2\pi)^3} C_{pp''} \delta(p' - p'') (2\pi)^3 = C_{pp'}. \end{aligned}$$

Здесь использовано то, что при  $|p| \neq |p'|$  функции  $\Phi_{p'}^-$  и  $\Phi_p^+$  ортогональны. Из (2.4) находим;

$$C_{pp'} = \frac{(\Phi_{p'}^- | H' | \Psi_p)}{E_p - E_{p'}}.$$

Следовательно,

$$\Psi_p = \Phi_p^+ + \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} \frac{(\Phi_{p'}^- | H' | \Psi_p)}{E_p - E_{p'}} \Phi_{p'}^- \quad (2.5)$$

Интегральное уравнение (2.5) эквивалентно дифференциальному уравнению (2.1). Запись уравнения для  $\Psi_p$  в интегральной форме имеет то преимущество, что в этой форме удобно получать последовательные приближения. Именно:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_p^{(0)} &= \Phi_p^+, \\ \Psi_p^{(1)} &= \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} \frac{(\Phi_{p'}^- | H' | \Phi_p^+)}{E_p - E_{p'}} \Phi_{p'}^-, \\ \Psi_p^{(2)} &= \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} \frac{(\Phi_{p'}^- | H' | \Psi_p^{(1)})}{E_p - E_{p'}} \Phi_{p'}^- \end{aligned} \right\} \quad (2.6)$$

и т. д.

Подынтегральное выражение (2.5) [или (2.6)] имеет особую точку при  $|p| = |p'|$ . Мы увидим, что способ обхода особой точки определяет асимптотический вид  $\Psi_p$ , т. е. ставит граничные условия. Мы покажем, что именно указанный на рис. 17 способ обхода (а не обход сверху и не интеграл в смысле главного значения) дает граничные условия (2.3).

Перейдем к вычислению интеграла в выражении (2.6) для  $\Psi_{p'}$  при  $r \rightarrow \infty$ . Функция  $\Phi_{p'}^-$  при  $r \rightarrow \infty$  имеет вид

$$\Phi_{p'}^- \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip'r x} + \frac{\hbar^-}{r} e^{-ip'r},$$



Рис. 17.

где

$$x = \cos \angle(p'r).$$

Первое слагаемое этого выражения приводит к интегралу в (2.6) вида

$$\int_{-1}^1 F(x) e^{ip'rx} dx.$$

Интегрируя по частям, имеем

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 F(x) e^{ip'rx} dx &= \frac{1}{ip'r} e^{ip'rx} F(x) \Big|_{-1}^1 - \\ &- \frac{1}{ip'r} \int_{-1}^1 e^{ip'rx} \frac{dF}{dx} dx \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \frac{F(1) e^{ip'r} - F(-1) e^{-ip'r}}{ip'r}. \end{aligned}$$

Покажем, что часть этого выражения, содержащая  $e^{-ip'r}$ , исчезает в пределе  $r \rightarrow \infty$  при интегрировании по  $dp'$ . Нужно оценить интеграл

$$\frac{1}{r} \int_{\Omega} \frac{dp'}{E_p - E_{p'}} e^{-ip'r} \Phi(p'). \quad (2.7)$$

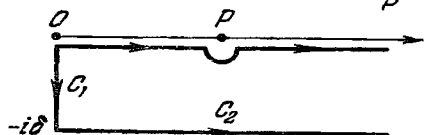


Рис. 18.

Контур интегрирования изображен на рис. 17. Заменим контур интегрирования на  $C_1 + C_2$  (рис. 18), взяв  $\delta$  достаточно

малым, чтобы между старым и новым контуром не было особых точек. Тогда величина интеграла (2.7) не изменится.

В интеграле по  $C_2$   $p' = \xi - i\delta$ ,  $\delta > 0$ , поэтому  $e^{-ip'r} = e^{-i\xi r} \cdot e^{-\delta r}$ . Экспонента  $e^{-\delta r}$  выносится за знак интеграла (2.7), и, следовательно, при  $r \rightarrow \infty$  весь интеграл по  $C_2$  экспоненциально мал. На участке  $C_1$   $p' = -it$ , и получается интеграл

$$\frac{1}{r} \int_0^{\delta} \frac{e^{-rt}}{E_p - E_{it}} \Phi(t) dt. \quad (2.8)$$

При  $r \rightarrow \infty$  интервал для  $t$ , существенный в подынтегральном выражении (2.8), порядка  $[0, 1/r]$ , следовательно,  $E_{it}$

мало в этом интервале,  $E_{it} \ll E_p$ . Поэтому интеграл (2.8) порядка  $\frac{1}{r} \int_0^{\delta} e^{-rt} dt \sim \frac{1}{r^2}$ , т. е. мал степенным образом.

По тем же соображениям мала степенным образом и часть интеграла в (2.6), содержащая слагаемое  $\frac{f_1^-}{r} e^{-ip'r}$  асимптотического выражения для  $\varphi_{p'}^-$ . В этом и состоит преимущество базисных функций  $\varphi_p^-$  по сравнению с  $\varphi_p^+$ .

Следовательно, в (2.6) остается лишь интеграл с  $e^{ip'r}$ . Для его вычисления выбираем контур, изображенный на рис. 19. Как и для интеграла с  $e^{-ip'r}$ , в этом случае интеграл по  $C_2 + C_3$  будет экспоненциально мал, а по  $C_1$  — мал степенным образом. Интегралы по  $C_3$  и  $C_4$  взаимно уничтожатся. Следовательно, весь интеграл сводится к вычету в точке  $p' = p$ :

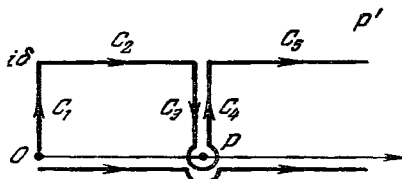


Рис. 19.

$$\Psi_p = \varphi_p^+ + 2\pi i \frac{2\pi p'^2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{(\varphi_{p'}^- | H' | \varphi_p^+)}{dE_p/dp} \frac{e^{ip'r}}{ip'r},$$

где  $p' = p \frac{r}{r}$ . Окончательно:

$$\Psi_p = \varphi_p^+ - \frac{p}{2\pi v} (\varphi_{p'}^- | H' | \varphi_p^+) \Big|_{p'=p \frac{r}{r}} \cdot \frac{e^{ip'r}}{r}.$$

Итак,  $\Psi_p$  имеет нужную асимптотику:

$$\Psi_p = e^{ipr} + \frac{(f_0 + f_1)}{r} e^{ipr},$$

причем

$$f_1 = -\frac{p}{2\pi v} (\varphi_{p'}^- | H' | \varphi_p^+) \Big|_{p'=p \frac{r}{r}}. \quad (2.9)$$

Для нерелятивистских частиц можно заменить  $p/v = m$ .

В случае свободного движения  $\varphi_p^+$  и  $\varphi_p^-$  — плоские волны,  $f_0 = 0$ , и мы получаем амплитуду рассеяния в так называемом борновском приближении:

$$f_1 = -\frac{p}{2\pi v} \int H'(r') e^{iqr'} dr',$$

где

$$q = p - p \frac{r}{r}$$

— передаваемый импульс при рассеянии:  $|q| = 2p \sin \frac{\theta}{2}$ , а  $\theta$  — угол рассеяния.

Найдем критерий применимости теории возмущений в непрерывном спектре. Принцип отыскания критерия любого приближенного расчета состоит в том, что приближенно вычисленная физическая величина должна быть велика по сравнению с поправкой к ней от следующего порядка приближения.

В рассматриваемом случае дополнительная амплитуда рассеяния равна

$$-\frac{m}{2\pi} \int \Phi_p^- H' \Psi_p dr'.$$

В первом порядке теории возмущений  $\Psi_p = \Phi_p^+$  и

$$f_1 = -\frac{m}{2\pi} \int \Phi_p^- H' \Phi_p^+ dr'.$$

Во втором порядке теории возмущений

$$f_2 = -\frac{m}{2\pi} \int \Phi_p^- H' \Psi_p^{(1)} dr' \sim m \int \Phi_p^- H' \frac{f_1}{r} e^{ipr'} dr'. \quad (2.10)$$

Условие  $f_2/f_1 \ll 1$  служит критерием применимости решения в рассматриваемой задаче.

Пусть  $a$  — порядок величины области пространства, в которой возмущающее поле  $H'(r)$  заметно отлично от нуля. Рассмотрим сначала случай  $pa \ll 1$ . Тогда функции  $\Phi_p^\pm(a)$  по порядку величины равны единице. Следовательно, амплитуда  $f_1$  порядка  $H'(a)a^3$  и слабо зависит от угла рассеяния. Поэтому  $f_2/f_1 \sim H'f_1a^2/f_1 \sim H'a^2$  и критерий теории возмущений имеет вид

$$H'a^2 \ll 1.$$

Рассмотрим теперь случай  $pa \gg 1$ . Более подробно этот случай исследован в 3.1. Рассеяние в этом предельном случае больших энергий резко анизотропно и направлено

вперед. Действительно, в выражении (2.9) величина

$$\varphi_p^{-*} \varphi_p^+ \sim e^{iqr} \sim e^{ipa \sin \frac{\theta}{2}}$$

сильно осциллирует при  $pa \gg 1$  для всех углов рассеяния  $\theta$ , кроме  $\theta \leq 1/pa \ll 1$ . Для углов рассеяния  $\theta \leq 1/pa$  величина  $\varphi_p^{-*}(a) \varphi_p^+(a)$  по порядку величины равна 1 и амплитуда рассеяния имеет оценку

$$f_1(\theta) \underset{\theta \leq 1/pa}{\sim} H'(a) a^3.$$

Для углов  $\theta \gg 1/pa$  амплитуда  $f_1(\theta)$  существенно уменьшается из-за осцилляции волновых функций  $\varphi_p^\pm$ .

### Рассеяние заряженных частиц на атомном ядре

В качестве примера рассмотрим рассеяние заряженных частиц (электронов или  $\mu$ -мезонов) на атомном ядре. Будем считать, что заряд ядра равномерно распределен по его объему. Тогда потенциальная энергия частицы:

$$V = \begin{cases} -\frac{Z}{R} \left( \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right), & 0 < r < R, \\ -\frac{Z}{r}, & r > R. \end{cases}$$

Здесь  $Z$  — заряд ядра,  $R$  — радиус ядра. Следовательно, возмущение имеет вид

$$H' = \begin{cases} -\frac{Z}{R} \left( \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) + \frac{Z}{r}, & 0 < r < R, \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

Согласно (2.9) дополнительная амплитуда рассеяния равна

$$f_1 = -\frac{1}{2\pi} \int \varphi_p^{-*} H' \varphi_p^+ dr \approx -\frac{1}{2\pi} \varphi_p^{-*}(0) \varphi_p^+(0) \int H' dr.$$

Действительно,  $H'$  изменяется на расстоянии порядка  $R$ , а  $\varphi_p$  — на расстоянии порядка  $1/p$ . Для не слишком больших скоростей электронов  $pR \ll 1$  (в атомных единицах  $R \leq 10^{-4}$ ). Поэтому в выражении для  $f_1$  функции  $\varphi_p^-$  и  $\varphi_p^+$  можно выносить из-под знака интеграла в точке  $r=0$ .

Вычисление дает

$$\int H' dr = \frac{2\pi ZR^2}{5}.$$

Следовательно,

$$f_1 = -\frac{ZR^2}{5} \varphi_p^{-*}(0) \varphi_p^+(0).$$

Кулоновские нерелятивистские волновые функции  $\varphi_p^\pm(0)$  равны\*): для поля отталкивания

$$\varphi_p^\pm(0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{-\pi/2\rho} \Gamma\left(1 \pm \frac{i}{\rho}\right),$$

для поля притяжения

$$\varphi_p^\pm(0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{\pm\pi/2\rho} \Gamma\left(1 \mp \frac{i}{\rho}\right),$$

где  $\Gamma\left(1 \pm \frac{i}{\rho}\right)$  — гамма-функция. Окончательно получаем:

$$f_1 = -\frac{1}{80\pi^3} \frac{ZR^2}{a_0} e^{\pm 2\pi/\rho} \Gamma^2\left(1 \pm \frac{i}{\rho}\right),$$

где знак минус относится к потенциалу отталкивания, а плюс — к потенциалу притяжения;  $a_0$  — боровский радиус.

Дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma/d\Omega$  равно

$$d\sigma/d\Omega = |f_0 + f_1|^2,$$

где  $f_0$  — амплитуда кулоновского рассеяния. Поскольку  $f_1$  не зависит от угла рассеяния, а  $f_0$  убывает с увеличением угла рассеяния, то учет конечности ядра существен при больших углах рассеяния.

Критерий применимости теории возмущений в этом случае ( $\rho R \ll 1$ ) — это  $H'R^2 \ll 1$  или  $ZR^2 \ll 1$ ; он выполняется для всех реальных ядер.

Мы не интересовались рассеянием налетающей частицы на атомных электронах. Амплитуды такого рассеяния можно вычислить, зная атомный форм-фактор. При не слишком малых углах рассеяния влиянием атомных электронов можно пренебречь.

\*) Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 603.



## 2. ВОЗМУЩЕНИЕ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ ДЕФОРМИРОВАННОГО ЯДРА

В этом разделе рассматривается случай, когда возмущение наложено на граничные условия. Преобразование координат позволяет привести граничные условия к невозмущенному виду. Однако оно изменяет выражение для гамильтониана системы. Это изменение гамильтониана и есть возмущающий потенциал, влияние которого можно рассмотреть с помощью обычной теории возмущений. Теория поясняется на примере расчета одночастичных энергетических уровней деформированного ядра.

Пусть нам известно решение стационарной (или нестационарной) задачи с гамильтонианом  $H(x)$  и граничным условием на некоторой поверхности  $S_0$ :

$$\alpha\Psi + \beta\Psi' |_{S_0} = 0.$$

Требуется найти решение задачи с тем же гамильтонианом  $H(x)$ , но с граничным условием

$$\alpha\Psi + \beta\Psi' |_S = 0,$$

причем поверхность  $S$  близка к  $S_0$  (эта близость и есть малый параметр в задаче). Для решения задачи следует найти такое преобразование координат  $x_i = f_i(x'_i)$ , что  $S(x) = S_0(x')$ , т. е. в новых переменных уравнение поверхности прежнее. Иными словами, если уравнение поверхности  $S_0$  есть  $\Phi_0(x_j) = 0$ , а  $S - \Phi(x_j) = 0$ , то должно быть

$$\Phi(f_i(x'_j)) = \Phi_0(x'_j).$$

Гамильтониан  $H(x_i) = H(f_i(x'_j))$  в новых переменных изменяется. Мы можем записать его в виде

$$H(x'_j) + H'(x'_j),$$

где  $H'(x'_j) = H(f_i(x'_j)) - H(x'_j)$  и есть возмущение. Далее применима уже обычная теория возмущений.

### Энергетические уровни деформированного ядра

Пусть известны стационарные уровни энергии в сферическом ящике, а нужно найти их в эллипсоидальном ящике (стенки считаем бесконечно высокими). Уравнение поверхности  $S_0$  имеет вид

$$\Phi_0(x_j) = 0: \quad \sum_{j=1}^3 x_j^2 - R^2 = 0,$$

а уравнение поверхности  $S$  есть

$$\Phi(x_j) = 0: \quad \sum_{j=1}^3 \frac{x_j^2}{a_j^2} - 1 = 0.$$

Введем новые переменные:

$$x_j = \frac{a_j x'_j}{R}.$$

Тогда  $\Phi(f_i(x'_j)) = \Phi_0(x'_j)$ . При этом изменяется оператор кинетической энергии частицы:

$$T(x_i) = -\frac{1}{2M} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = -\frac{R^2}{2M} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{a_i^2} \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2}.$$

Следовательно, возмущение имеет вид

$$H'(x'_i) = -\frac{1}{2M} \sum_{i=1}^3 \left( \frac{a_i^2}{R^2} - 1 \right) \frac{\partial^2}{\partial x_i'^2}.$$

Оно мало, если все  $a_i$  близки к  $R$ .

Рассмотрим эллипсоидальную деформацию ядра, считая эллипсоид двухосным (с полуосями  $a$  и  $b$ ). Параметром деформации называется величина

$$\beta = 2 \frac{a-b}{a+b}.$$

Считаем, что объем ядра не меняется при его деформации, т. е.  $ab^2 = R^3$ . Если написать  $a = R(1 + \delta)$ ,  $b = R(1 - \delta_1)$ , где  $\delta, \delta_1 \ll 1$ , то в первом приближении из  $ab^2 = R^3$  получим  $\delta - 2\delta_1 = 0$ , т. е.

$$\beta = 2 \frac{R(1+2\delta_1) - R(1-\delta_1)}{2R} \approx 3\delta_1,$$

или

$$a \approx R \left( 1 + \frac{2}{3} \beta \right),$$

$$b \approx R \left( 1 - \frac{1}{3} \beta \right).$$

Тогда возмущение  $H'$  принимает следующий вид:

$$H' = -\frac{1}{2M} \left\{ \left[ \frac{R^2}{R^2 \left( 1 + \frac{2}{3} \beta \right)^2} - 1 \right] \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \right. \\ \left. + \left[ \frac{R^2}{R^2 \left( 1 - \frac{1}{3} \beta \right)^2} - 1 \right] \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right\} \approx -\frac{\beta}{3M} \left( \Delta - 3 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right).$$

Пусть  $\varepsilon_{nlj}^0$  — энергия частиц без учета деформации ядер (от магнитного квантового числа она не зависит в силу

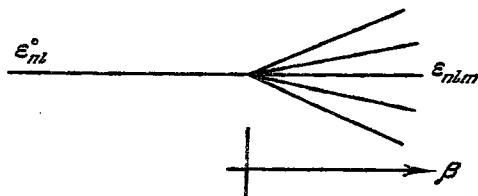


Рис. 20.

сферической симметрии поля). С учетом деформации в первом порядке теории возмущений получаем

$$\varepsilon_{nljm} = \varepsilon_{nlj}^0 + \langle \Psi_{nljm}^{(0)} | H' | \Psi_{nljm}^{(0)} \rangle.$$

В результате расчета находим

$$\varepsilon_{nljm} = \varepsilon_{nlj}^0 \left[ 1 + \beta \left( \frac{m^2}{j(j+1)} - \frac{1}{3} \right) \right].$$

Зависимость  $\varepsilon_{nljm}$  от  $\beta$  схематически изображена на рис. 20.

Заметим, что  $\frac{1}{2j+1} \sum_m \varepsilon_{nljm} = \varepsilon_{nlj}^0$ , т. е. центр тяжести мультиплета не смещается при деформации ядра.

**Задача.** Вычислить  $\varepsilon_{nlm}$  в квазиклассическом приближении.

### 3. ВНЕЗАПНЫЕ ВОЗМУЩЕНИЯ.

#### ИОНИЗАЦИЯ ПРИ $\beta$ -РАСПАДЕ И УДАРЕ ОБ ЯДРО

В рассматриваемых до сих пор примерах малым параметром задачи было относительное изменение гамильтониана системы. Изучим случай, когда малым параметром является время действия возмущения, но само возмущение не мало.

Ионизация при  $\beta$ -распаде — один из примеров такого возмущения. В этом случае скорость  $\beta$ -распадного электрона много больше скоростей атомных электронов. Поэтому изменение заряда ядра — внезапное событие для них. Другой пример — ионизация при ударе быстрой частицы о ядро. В этом случае внезапным событием для атомных электронов служит отдача ядра.

Рассмотрим систему, волновая функция которой подчиняется уравнению Шредингера  $i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi$  с гамильтонианом

$$H = \begin{cases} H_1(\mathbf{r}), & t < 0, \\ H_2(\mathbf{r}), & t > \tau. \end{cases}$$

Предположим, что гамильтониан системы сильно изменяется за короткое время  $\tau$ . Введем полную систему функций гамильтониана  $H_2$ :

$$H_2 \varphi_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(2)} \varphi_n^{(2)}$$

и разложим решение задачи  $\Psi$  по функциям  $\varphi_n^{(2)}$ :

$$\Psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n^{(2)} e^{-i\varepsilon_n^{(2)} t}.$$

Запишем гамильтониан  $H$  в виде  $H = H_2 + (H - H_2) = H_2 + V$ . Тогда

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i \sum_n \varphi_n^{(2)} e^{-i\varepsilon_n^{(2)} t} \left( \frac{da_n}{dt} - i\varepsilon_n^{(2)} a_n \right),$$

$$H \Psi = \sum_n a_n(t) e^{-i\varepsilon_n^{(2)} t} (\varepsilon_n^{(2)} \varphi_n^{(2)} + V \varphi_n^{(2)}),$$

откуда

$$i \frac{da_n}{dt} = \sum_m V_{nm} e^{-i[\varepsilon_m^{(2)} - \varepsilon_n^{(2)}] t} a_m(t). \quad (2.11)$$

Этот результат мог быть получен и без вычислений. Если временно обозначить  $b_n(t) = a_n(t) e^{-i\varepsilon_n^{(2)}t}$ , то фактически разложение  $\Psi(t) = \sum_n b_n(t) \varphi_n^{(2)}$  означает переход от координатного к энергетическому представлению гамильтониана  $H_2$ . Уравнение Шредингера в новом представлении имеет такой вид:

$$i \frac{\partial b_n}{\partial t} = \sum_m [\varepsilon_n^{(2)} \delta_{nm} + V_{nm}] b_m,$$

откуда сразу же получаем уравнение (2.11).

Интегрируя полученное уравнение, имеем

$$a_n(t) - a_n(0) = -i \sum_m \int_0^t V_{nm} a_m(t) e^{-i[\varepsilon_m^{(2)} - \varepsilon_n^{(2)}]t} dt. \quad (2.12)$$

Матричный элемент  $V_{nm}$  обращается в нуль при  $t \gg \tau$ . Предположим, что  $(\varepsilon_n^{(2)} - \varepsilon_m^{(2)})\tau \ll 1$ . Тогда экспонента под интегралом приближенно равна единице. Следовательно, для того чтобы пользоваться последовательными приближениями, должно выполняться условие  $V\tau \ll 1$  (возмущение не является малым, но оно действует короткое время).

В нулевом приближении из (2.12) имеем  $a_n^{(0)}(t) = a_n(0)$ . Заменяя в правой части уравнения (2.12) в первом приближении  $a_m(t)$  на  $a_m(0)$ , получим

$$a_n^{(1)}(t) = -i \sum_m \int_0^t (\varphi_n^{(2)} | V | \varphi_m^{(2)}) a_m(0) dt.$$

Так как

$$\sum_m a_m(0) \varphi_m^{(2)} = \Psi(0),$$

то в первом приближении находим

$$a_n^{(1)}(t) = -i \int_0^t (\varphi_n^{(2)} | V | \Psi(0)) dt.$$

Предположим, что начальное состояние  $\Psi(0)$  было одной из собственных функций  $H_1$ , т. е.

$$\Psi(0) = \varphi_{n_0}^{(1)} = \sum a_n(0) \varphi_n^{(2)}.$$

Следовательно,  $a_n(0) = (\varphi_{n_0}^{(1)} | \varphi_n^{(2)})$ . Итак, в нулевом при-

ближении вероятность перехода в состояние  $\varphi_n^{(2)}$  есть

$$W_{nn_0} = |\langle \varphi_n^{(1)} | \varphi_n^{(2)} \rangle|^2. \quad (2.13)$$

В пространстве векторов  $\Psi(t)$  с базисом  $\varphi_n$  внезапное возмущение соответствует сильному изменению базиса:  $\varphi_n^{(1)} \rightarrow \varphi_n^{(2)}$ , при малом изменении волновой функции:  $\Psi(t) \approx \Psi(0)$ .

### Ионизация атомов при $\beta$ -распаде

Расчет ионизации атома при  $\beta$ -распаде сильно упрощается, если использовать тот факт, что скорость  $\beta$ -распадного электрона много больше скоростей атомных электронов. Покажем, что ионизация вызывается изменением заряда ядра, а непосредственным взаимодействием атомного и  $\beta$ -распадного электронов можно пренебречь.

Сначала оценим вероятность электронного перехода, вызываемого непосредственным взаимодействием. Согласно теории возмущений она равна

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty V_{nn_0} e^{i\omega_{nn_0} t} dt \right|^2. \quad (2.14)$$

Здесь  $V_{nn_0}$  — матричный элемент энергии взаимодействия, а  $\omega_{nn_0}$  — частота перехода.

Оценим это выражение. Величина  $\omega_{nn_0}$  имеет порядок атомных частот. Время пролета  $\beta$ -распадного электрона  $\tau$  много меньше атомных периодов, т. е.  $\omega_{nn_0} \tau \ll 1$ . Поэтому в (2.14) можно заменить  $e^{i\omega_{nn_0} t} \rightarrow 1$ . Взаимодействие  $V$   $\beta$ -электрона с атомным электроном имеет порядок величины  $e^2/a$ , где  $a$  — величина порядка атомных размеров. Так как при  $\beta$ -распаде электрон вылетает из атома со скоростью порядка скорости света  $c$ , то время вылета  $\tau \sim a/c$ . Следовательно, вероятность  $W$  имеет оценку:

$$W \sim \frac{1}{\hbar^2} V^2 \tau^2 \sim \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{a} \frac{a}{c} \right)^2 \sim \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \ll 1.$$

Вычислим теперь вероятность ионизации вследствие изменения заряда ядра. Как мы только что видели, волновая функция атомных электронов мало меняется за время вылета  $\beta$ -распадного электрона. Поэтому вероятность ионизации электрона, находившегося в состоянии  $\Psi_0^Z$  в поле ядра с

зарядом  $Z$ , согласно (2.13) равна

$$W_{0,E} = |(\Psi_0^Z | \Psi_E^{Z+1})|^2. \quad (2.15)$$

Здесь  $\Psi_E^{Z+1}$  — волновая функция вылетевшего электрона с энергией  $E > 0$  в поле ядра с зарядом  $Z+1$ . Полная вероятность ионизации из-за изменения заряда ядра равна

$$W_0 = \int_0^\infty W_{0,E} dE. \quad (2.16)$$

Оценим (2.16). Для этого разложим функцию  $f(Z_1, Z_2) = (\Psi_0^{Z_1} | \Psi_E^{Z_2})$  в ряд по разности  $Z_1 - Z_2$ :

$$f(Z_1, Z_2) \approx (\Psi_0^{Z_1} | \Psi_E^{Z_1}) + (Z_1 - Z_2) \frac{\partial f}{\partial Z_1} \Big|_{Z_1=Z_2} = (Z_1 - Z_2) \frac{\partial f}{\partial Z_1} \Big|_{Z_1=Z_2}.$$

Производная  $\frac{\partial f}{\partial Z_1} \Big|_{Z_1=Z_2} = (\Psi_E^{Z_1} | \frac{\partial \Psi_0^{Z_1}}{\partial Z_1}) \sim \frac{1}{Z_1}$ . Следовательно,  $(\Psi_0^{Z_1} | \Psi_E^{Z_2}) \sim \frac{Z_1 - Z_2}{Z_1} = \frac{1}{Z_1}$ , т. е.

$$W_0 \sim \frac{1}{Z^2}. \quad (2.17)$$

Итак, относительное влияние непосредственного взаимодействия имеет порядок величины

$$\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 = \left(\frac{Z}{137}\right)^2 \ll 1.$$

Оно выполняется для всех ядер, кроме самых тяжелых.

Из (2.14) можно сделать заключение о правилах отбора для рассматриваемого процесса. В случае ионизации внутренних оболочек самосогласованное поле, в котором движется электрон, можно считать сферически симметричным, следовательно,  $\Psi = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ . Подставляя это  $\Psi$  в (2.14), получим правила отбора:

$$l_1 = l_2, \quad m_1 = m_2.$$

Для наружных оболочек эффективный заряд  $Z$ , действующий на атомные электроны, порядка 1. Следовательно, согласно (2.17) и вероятность ионизации  $W_k \sim 1$ . Это подтверждается экспериментами по накоплению положительных ионов при  $\beta^\pm$ -распаде.

Вероятность ионизации можно вычислить до конца для  $K$ - и  $L$ -оболочек. В этих случаях существенна область вблизи ядра, где функции  $\Psi_0^Z$  и  $\Psi_E^{Z+1}$  можно считать водородоподобными (пользование водородоподобными функциями вносит погрешность порядка  $1/Z$ ).

Вероятность ионизации быстро убывает, когда энергия вылетающего электрона становится много больше потенциала ионизации. Действительно, в этом случае функция  $\Psi_E^{Z+1}$  много раз осциллирует на атомных размерах и интеграл (2.15) мал. Таким образом, вылетающие электроны имеют энергию между нулем и величиной порядка потенциала ионизации.

Получим вероятность ионизации для  $K$ -электрона, когда энергия вылетающего атомного электрона много больше потенциала ионизации. Радиальная волновая функция  $R_E^{Z+1}$  при больших энергиях должна совпадать с радиальной функцией свободной частицы:

$$R_E^{Z+1} \underset{E \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin kr.$$

Здесь  $k = \sqrt{2E}$ . Функция  $R_E$  нормирована на интервал энергий:

$$\int_0^{\infty} R_E R_{E'} r^2 dr = \delta(E - E').$$

Следовательно,

$$W_{1E} = \left| \int_0^{\infty} R_1^Z R_E^{Z+1} r^2 dr \right|^2 \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{2}{\pi k} \left| \int_0^{\infty} R_1^Z \sin kr r dr \right|^2.$$

Для  $K$ -электрона  $R_1^Z = 2Z^{3/2} e^{-Zr}$ . Следовательно, нужно вычислить интеграл  $I = \int_0^{\infty} r e^{-Zr} \sin kr dr$  при  $k \rightarrow \infty$ . Интегрируя его по частям, получаем  $I \approx 2Z/k^3$  (интеграл вычислялся в 1.1, стр. 19, и на стр. 53).

Итак, при  $E \gg Z^2$  вероятность ионизации  $K$ -электрона приближенно равна:

$$W_{1E} \approx \frac{8Z^3}{\pi k} \left( \frac{2Z}{k^3} \right)^2 = \frac{32 Z^5}{\pi k^7} \quad \text{или} \quad W_{1E} \underset{E \rightarrow \infty}{\approx} \frac{2 \sqrt{2}}{\pi} \frac{Z^5}{E^{7/2}}.$$



### Ионизация атомов при ядерных реакциях

При ядерных столкновениях с большой передачей энергии должна происходить ионизация атомов отдачи. Если скорость, приобретенная ядром, невелика, то ядро успевает увлечь электроны, и ионизация происходит только в наружных, слабо связанных оболочках. Наоборот, при больших скоростях ядро вылетает из оболочки, не увлекая ее за собой.

Вычислим вероятность ионизации при ударе нейтрона о ядро. Время соударения нейтрона с ядром  $\tau \sim R/v_n$ , где  $R$  — радиус ядра,  $v_n$  — скорость нейтрона. Это время много меньше электронных периодов  $\tau_e$ . Поэтому за время столкновения электронная волновая функция практически не меняется.

Если обозначить через  $v_n$  скорость, приобретенную ядром, то смещение  $l$  ядра за время соударения имеет порядок величины  $l \sim v_n \tau \sim \frac{v_n}{v_n} R \sim \frac{M_n}{M_n} R < R$ , т. е.  $l$  много меньше размеров электронной оболочки. Следовательно, ядро практически не смещается за время удара.

Перейдем к системе координат, в которой ядро после соударения покоится. Тогда волновая функция начального состояния преобразуется в выражение

$$\Psi_0 \rightarrow e^{i v_n \Sigma r_i} \Psi_0(r_1, r_2, \dots),$$

где  $v_n$  — скорость отдачи ядра. Это выражение проще всего получить, разлагая  $\Psi_0$ -функцию по плоским волнам и сдвигая каждый из импульсов этих волн на величину  $v_n$ . Пусть  $\Psi_1(r_1, r_2, \dots)$  обозначает конечное состояние атома. Вероятность возбуждения согласно (2.13) равна

$$W = |(\Psi_1 | e^{i v_n \Sigma r_i} | \Psi_0)|^2. \quad (2.18)$$

Критерий применимости этой формулы:  $\tau \ll \tau_e$ . Его можно записать также в виде  $\frac{R}{v_n} \ll \frac{a}{v_e}$  или  $v_n \gg \frac{R}{a} v_e$ , где  $a$  — величина порядка размеров изучаемой оболочки.

Из выражения (2.18) можно получить формулу для вероятности перехода одного фиксированного электрона. Так как взаимодействие между электронами мало по сравнению с полем ядра при  $Z \gg 1$ , то

$$W = W_1 W_2,$$

где  $W_1$  — вероятность перехода рассматриваемого электрона, а  $W_2$  — вероятность возбуждения всех остальных электронов.

Суммируя по всем конечным состояниям, получим  $\sum_1 W_1 = 1$ ,  $\sum_2 W_2 = 1$ . Следовательно, вероятность перехода рассматриваемого электрона из состояния  $\psi_0$  в состояние  $\psi_n$  равна

$$W = W_1 \sum_2 W_2 = \left| \int \psi_n e^{i\mathbf{v}_j \mathbf{r}} \psi_0 d\mathbf{r} \right|^2. \quad (2.19)$$

Если скорость ядра много меньше скорости электрона (но  $v_j \gg v_a \frac{R}{a}$ ), то экспоненту в (2.19) можно разложить в ряд. Нулевой член разложения исчезает из-за ортогональности функций  $\psi_0$  и  $\psi_n$ . Пусть скорость  $\mathbf{v}_j$  направлена по оси  $z$ . Тогда

$$W = v_j^2 |(\psi_n | z | \psi_0)|^2. \quad (2.20)$$

Наоборот, если  $v_j \gg v_a$ , то экспонента  $e^{i\mathbf{v}_j \mathbf{r}}$  в (2.18) [или (2.19)] быстро осциллирует. Следовательно, вероятность перехода  $W$  не мала, только если  $\Psi_1 \sim e^{-i\mathbf{v}_j \mathbf{r}}$ , т. е., когда электроны в новой системе движутся со скоростью —  $\mathbf{v}_j$ . В лабораторной системе координат это соответствует тому, что электронная оболочка не увлекается ядром при ударе.

Если скорость ядра  $v_j$  больше скорости внешних электронов, но меньше скорости внутренних электронов, т. е.  $1 < v_j < Z$ , то внутренние оболочки атома увлекаются ядром, а наружные — нет. Заряд получающегося иона равен по порядку величины числу электронов на наружных оболочках.

Такие соображения позволяют оценить заряд осколков при делении. Заряд определяется как число электронов со скоростями, меньшими чем скорость осколка (см. стр. 85).

Для атома водорода и для внутренних оболочек других атомов вычисления можно довести до конца. Вероятность ионизации и возбуждения для этих случаев приводится в задачах.

Оценим полную вероятность возбуждения и ионизации  $W$  при  $v_j \ll 1$ . Из (2.20) находим

$$W = C_1 v_j^2,$$

где  $C_1$  — число порядка единицы. Из решения задачи 6 следует, что вероятность атому водорода остаться в основном состоянии равна

$$W_{00} = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4} v_{\alpha}^2\right)^4}.$$

Отсюда находим, что для атома водорода  $C_1 = 1$ .

### Передача энергии при вылете кванта из ядра молекулы (эффект Мёссбауэра)

Предположим, что квант с энергией  $\hbar\omega$  вылетает из ядра, входящего в молекулу. Если  $\hbar\omega$  мало, то молекула получает слабый толчок и воспринимает отдачу как единое целое. Если  $\hbar\omega$  велико, то ядро вылетает из молекулы — происходит возбуждение системы (те же соображения применимы и к металлам: при малом  $\omega$  отдачу воспринимает вся кристаллическая решетка).

Оценим время вылета  $\tau$  кванта из ядра;  $\tau$  — это время пролета пакета радиуса  $\lambda = c/\omega$  через область ядра, т. е.  $\tau \sim \lambda/c = 1/\omega$ . Эта оценка неверна при  $\lambda < R$ , где  $R$  — радиус ядра, т. е. при  $\omega > c/R \sim 137 \cdot 10^4 \cdot 27 \text{ эв} \sim 40 \text{ Мэв}$ .

Время  $\tau$  ничтожно по сравнению с временами, характеризующими колебания и вращения молекулы. Следовательно,  $\Psi$ -функция молекулы не успевает измениться за время вылета кванта. Задача напоминает задачу об ионизации при ядерных реакциях. Волновая функция молекулы в начальный момент после испускания кванта имеет вид

$$\Psi' = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) e^{iM\mathbf{v}\mathbf{r}_1},$$

где  $\mathbf{v}$  — скорость отдачи,  $\mathbf{r}_1$  — радиус-вектор ядра, из которого вылетел квант,  $M$  — масса атома. Функция  $\Psi$  описывает основное состояние молекулы. Вероятность того, что молекула останется невозбужденной, равна

$$W_0 = |(\Psi_0 | e^{iM\mathbf{v}\mathbf{r}_1} | \Psi_0)|^2. \quad (2.21)$$

Если  $M\mathbf{v}\mathbf{r}_1 \ll 1$ , то  $W_0 \sim 1$ , т. е. отдача воспринимается всей молекулой, возбуждения нет.

Оценим частоту  $\gamma$ -кванта  $\omega$ , начиная с которой возбуждаются колебательные степени свободы молекулы. Как мы увидим, амплитуда колебаний имеет порядок величины  $1/\sqrt[4]{M}$ . Поэтому в (2.21)  $r_1 \sim 1/\sqrt[4]{M}$ . Следовательно, для того чтобы колебания не возбуждались, должно быть  $Mv \frac{1}{\sqrt[4]{M}} \ll 1$ . Так как импульс ядра  $p_{\text{я}} = Mv$  равен импульсу кванта  $\hbar\omega/c$ , это условие означает, что  $\hbar\omega/c \ll \sqrt[4]{M}$ , или  $\omega \ll 137 \sqrt[4]{M}$  (в атомных единицах); в эв:

$$\omega \ll 137 \sqrt[4]{100 \cdot 1840 \cdot 27} \text{ эв} \sim 70 \text{ кэв}$$

(здесь взято ядро с  $A \sim 100$ ).

Критерий применимости (2.21):

$$\hbar\omega \gg \hbar\omega_{\text{кол}} \sim 1/\sqrt{M} \sim \frac{27}{\sqrt{100 \cdot 1840}} \sim 0,06 \text{ эв},$$

где  $\omega_{\text{кол}}$  — колебательная частота молекулы.

Оценим теперь частоту кванта, начиная с которой возбуждаются вращательные степени свободы молекулы. Для этого рассмотрим плоский ротатор. Его волновая функция  $\psi_m = e^{im\phi}$ . Вероятность перехода из состояния  $\psi_0$  в состояние  $\psi_m$  согласно (2.21) равна

$$w_{m0} = \left| \int \psi_m e^{iMvr} \psi_0 dr \right|^2 \sim \left| \int_0^{2\pi} e^{im\phi + iMva \cos \phi} d\phi \right|^2, \quad (2.22)$$

где  $a$  — величина порядка размеров молекулы.

Следовательно, для того чтобы вращательные уровни не возбуждались, необходимо, чтобы момент количества движения  $\sim Mva$ , сообщенный молекуле квантом, был много меньше момента количества движения ротатора  $m\hbar$ . В этом случае из (2.22) находим  $w_{m0} \ll 1$  для наименьшего возбуждения ( $m=1$ ) получаем

$$Mva \ll \hbar \quad \text{или} \quad \frac{\hbar\omega}{c} a \ll \hbar,$$

откуда  $\hbar\omega \ll c = 137 \cdot 27 \text{ эв} \sim 4 \text{ кэв}$ .

## ЗАДАЧИ

1. Убедиться в том, что отдача ядра не существенна для ионизации атома при  $\beta$ -распаде.

2. Вычислить вероятность возбуждения  $K$ -электрона при  $\beta$ -распаде в состояние дискретного спектра с главным квантовым числом  $n$  и вероятность того, что электрон останется в  $s$ -состоянии ( $Z \gg 1$ ).

Ответ.

$$W_{1n} = 2^6 \frac{(n-1)^{2n-4}}{(n+1)^{2n+4}} n^5 \frac{1}{Z^2}, \quad W_{11} = 1 - \frac{3}{4} \frac{1}{Z^2}.$$

3. Используя метод Томаса — Ферми, оценить заряд осколков при делении ядра, считая его равным числу электронов со скоростью, меньшей скорости осколков.

Ответ.

$$Z_{\text{оск}} \sim 8.$$

4. Найти вероятность перехода  $K$ -электрона при  $\beta$ -распаде в состояние непрерывного спектра с энергией  $E$  и полную вероятность ионизации ( $Z \gg 1$ ).

Ответ.

$$W_{1E} = 2^7 \frac{e^{-\frac{4Z}{k} \arctg \frac{k}{Z}}}{\left(1 + \frac{k^2}{Z^2}\right)^4 \left(1 - e^{-\frac{2\pi Z}{k}}\right)} \frac{1}{Z^2}, \quad W_1 = \frac{0,32}{Z^2}.$$

5. Оценить ионизацию атома из-за магнитного взаимодействия налетающего нейтрона с электроном.

Ответ.

$$\frac{W_{\text{магн}}}{W} \leq \left| \frac{V_{\text{магн}} \tau}{v_n} \right|^2 \sim \left| \frac{\mu_{\text{н}}^{11} \epsilon}{a^3} \frac{R}{v_n^2} \right|^2 \ll \left| \frac{1}{M_n c^2} \frac{1}{R} \right|^2 \sim 10^{-7}.$$

6. Определить вероятность того, что при ударе нейтрона о ядро атома водорода электрон останется в основном состоянии.

Ответ.

$$W_{11} = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{4} v_n^2\right)^4}.$$

7. Вычислить вероятность ионизации атома водорода при столкновении его с нейтроном.

О т в е т.

$$W_{ok} dk = 2^8 \frac{v_n^2 \left( v_n^2 + \frac{1}{3} k^2 + \frac{1}{3} \right) e^{-\frac{2}{k} \operatorname{arctg} \frac{2k}{v_n^2 - k^2 + 1}}}{[(v_n + k)^2 + 1] [(v_n - k)^2 + 1] [1 - e^{-2\pi/k}]} k dk.$$

8. Вычислить полную вероятность ионизации атома водорода при столкновении его с нейтроном, когда скорость ядра много меньше скорости электрона.

О т в е т.

$$W_1 = 0,28 v_n^2.$$

#### 4. АДИАБАТИЧЕСКИЕ ВОЗМУЩЕНИЯ

В этом разделе рассматривается случай, когда возмущение, действующее на квантовомеханическую систему, медленно меняется со временем. При этом система успевает перестраиваться вслед за медленным изменением параметров. Такие возмущения называются адиабатическими.

В случае адиабатических возмущений удобно искать решение уравнения Шредингера в виде суперпозиции стационарных собственных функций, вычисленных при произвольных, но фиксированных значениях параметров.

Предположим, что гамильтониан  $H(x, \xi)$  зависит от медленно меняющегося параметра  $\xi$ . Введем собственные функции  $\varphi_m(x, \xi)$  гамильтониана  $H(x, \xi)$ , в которых значение  $\xi$  зафиксировано:

$$H(x, \xi) \varphi_m(x, \xi) = \varepsilon_m(\xi) \varphi_m(x, \xi). \quad (2.23)$$

Будем искать решение уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad (2.24)$$

в виде

$$\Psi = \sum_m a_m(t) \varphi_m(x, \xi) \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t \varepsilon_m(\xi) dt \right\}. \quad (2.25)$$

Подставляя (2.25) в (2.24), находим

$$i \sum_m \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t \varepsilon_m(\xi) dt \right\} \left( \frac{da_m}{dt} - i \varepsilon_m a_m + a_m \dot{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \varphi_m(x, \xi) = \\ = \sum_m \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t \varepsilon_m(\xi) dt \right\} \varepsilon_m \varphi_m(x, \xi),$$

откуда

$$\frac{da_n}{dt} + \sum_m \left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right) \dot{\xi} a_m \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^t (\varepsilon_m - \varepsilon_n) dt \right\} = 0. \quad (2.26)$$

Уравнение (2.26) эквивалентно исходному уравнению Шредингера (2.24). В отличие от (2.24), оно удобно для нахождения последовательных приближений при малых  $\dot{\xi}$ . Именно,

$$a_n^{(0)}(t) = a_n(-\infty),$$

$$a_n^{(1)}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' \sum_m \left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right) \dot{\xi} \times \\ \times a_m(0) \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{t'} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) dt' \right\} \quad (2.27)$$

и т. д.

Выразим  $\left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right)$  через матричный элемент гамильтониана  $H$ . Дифференцируя соотношение (2.23) по параметру  $\xi$ , находим

$$\frac{\partial H}{\partial \xi} \varphi_m + H \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} = \frac{d\varepsilon_m}{d\xi} \varphi_m + \varepsilon_m \frac{d\varphi_m}{d\xi}.$$

Умножая это равенство на  $\varphi_n$  слева и интегрируя по  $x$ , получаем

$$\left( \varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right) + \varepsilon_n \left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right) = \frac{d\varepsilon_m}{d\xi} \delta_{nm} + \varepsilon_m \left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right),$$

откуда

$$\left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_m}{\partial \xi} \right. \right)_{n \neq m} = \frac{\left( \varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right)}{\varepsilon_m - \varepsilon_n}, \quad \left( \varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_n \right) = \frac{d\varepsilon_n}{d\xi}. \quad (2.28)$$

Будем предполагать, что собственные состояния  $\varphi_n$  не вырождены. Тогда волновые функции  $\varphi_n$  можно выбрать вещественными, и, следовательно, диагональный матричный элемент

$$\left( \varphi_n \left| \frac{\partial \varphi_n}{\partial \xi} \right. \right) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} \int \varphi_n^2 d\tau = 0.$$

Подставляя (2.28) в (2.27), получаем

$$a_n^{(1)}(t) = - \int_{-\infty}^t dt' \sum'_m \frac{\left( \varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right) \xi}{\varepsilon_m - \varepsilon_n} \times \\ \times a_m(-\infty) \exp \left\{ -i \int_{-\infty}^{t'} (\varepsilon_m - \varepsilon_n) dt' \right\}. \quad (2.29)$$

Штрих в сумме по  $m$  означает, что в ней нет диагональных членов.

Критерий применимости адиабатической теории возмущений состоит в том, чтобы изменение гамильтониана за время порядка обратных частот системы было малым по сравнению с энергиями, соответствующими этим частотам.

Критерий применимости легко получить, если оценить отношение поправки  $a_n^{(2)}(t)$  к амплитуде  $a_n^{(1)}(t)$ : учитывая (2.29), находим

$$\frac{a_n^{(2)}}{a_n^{(1)}} \sim \frac{\partial H}{\partial t} \frac{1}{(\varepsilon_m - \varepsilon_n)^2}. \quad (2.30)$$

Как видно из (2.30), требует отдельного рассмотрения случай, когда при некоторых значениях параметров  $\xi$  уровни энергии пересекаются. В этом случае волновую функцию следует искать в виде суперпозиции состояний, соответствующих этим пересекающимся термам.

Покажем, что если обратные собственные частоты системы  $\omega_{mn}^{-1}$  много меньше времени  $\tau$ , за которое существенно изменяется гамильтониан системы, то эта система, как правило, будет возбуждаться экспоненциально слабо. Действительно, выражение (2.29) для амплитуды перехода  $a_n^{(1)}(t)$  сводится к фурье-компонентам от функций  $\frac{\left( \varphi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \xi} \right| \varphi_m \right) \xi}{\varepsilon_n - \varepsilon_m}$ . Раньше (см. 1.1) мы видели, что такие фурье-



компоненты при  $\omega_{mn}\tau \gg 1$  экспоненциально малы ( $\sim e^{-\omega_{mn}\tau}$ ), если эти функции или их производные не имеют особенностей на вещественной оси.

Как мы видели (см. стр. 53), кулоновские волновые функции имеют особенности на вещественной оси. Поэтому, например, вероятность ионизации атома пролетающей медленной частицей мала степенным образом, а не экспоненциально.

**Задача.** Используя соотношение (2.28), вычислить  $\overline{\frac{1}{r^2}}$  для центрально-симметричного движения.

**Ответ.**

$$\overline{\frac{1}{r^2}} = \frac{1}{l+1/2} \left( \frac{\partial E}{\partial l} \right)_{nr}.$$

### Захват электрона протоном (перезарядка)

Применим адиабатическую теорию возмущений к задаче о перезарядке при пролете медленного протона мимо атома водорода. Предположим, что скорость протона много меньше атомной скорости. Тогда можно применять адиабатическое приближение.

Кроме того, предположим, что энергия налетающего протона много больше атомной. Тогда можно считать движение протона заданным.

Гамильтониан системы имеет вид

$$H = T_e - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R},$$

где  $R$  — расстояние между протонами, которое мы будем считать заданной функцией времени;  $r$  — координата электрона,  $T_e$  — кинетическая энергия электрона.

Гамильтониан  $H$  симметричен относительно перестановки налетающего и покоящегося протонов. Такая перестановка эквивалентна замене  $r \rightarrow -r$ . Следовательно, можно ввести симметричные и антисимметричные относительно этой перестановки собственные функции гамильтониана  $H$ :  $\varphi_n^s(r, R)$  и  $\varphi_n^a(r, R)$ .

Будем считать, что сначала электрон находился около протона, имеющего координату  $R/2$ . Тогда волновая функция электрона имеет вид

$$\varphi = \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right),$$

где  $\varphi_{n_0}^Q$  — кулоновская волновая функция для состояния  $n_0$ .

После рассеяния атом водорода с большой вероятностью останется в состоянии  $\varphi_{n_0}^Q$ . Действительно, для возбуждения нужна компонента Фурье с частотой, равной энергии возбуждения,  $\omega_{nn_0} = \varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}$ . При медленном пролете, когда время пролета велико по сравнению с обратной частотой  $\omega_{nn_0}^{-1}$ , компонента Фурье с частотой  $\omega_{nn_0}$  очень мала и возбуждения не происходит.

Однако электрон может перейти к другому протону. Это явление называется перезарядкой. Критерий адиабатичности (2.30) здесь не выполняется. В самом деле, когда протоны находятся на большом расстоянии друг от друга, волновая функция электрона равна  $\varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right)$ , если он находится у одного протона, и  $\varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right)$ , — если у другого. Из этих двух функций можно составить симметричную и антисимметричную комбинации  $\varphi_{n_0}^s$  и  $\varphi_{n_0}^a$ . Оба состояния отвечают одной и той же энергии. Следовательно, мы имеем дело с пересечением уровней.

Поэтому решение уравнения Шредингера

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H \Psi \quad (2.31)$$

следует искать в виде суперпозиции этих двух состояний  $\varphi_{n_0}^s$  и  $\varphi_{n_0}^a$ , после чего нужно применять адиабатическую теорию возмущений. Итак,

$$\Psi = C^s(t) \varphi_{n_0}^s(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \exp \left( -i \int_{-\infty}^t \varepsilon^s dt \right) + \\ + C^a(t) \varphi_{n_0}^a(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \exp \left( -i \int_{-\infty}^t \varepsilon^a dt \right). \quad (2.32)$$

Подставляя (2.32) в (2.31), получаем

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{dC^s}{dt} \varphi_{n_0}^s(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + C^s \frac{dR}{dt} \frac{\partial \varphi_{n_0}^s(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{\partial R} \right\} \exp \left( -i \int_{-\infty}^t \varepsilon^s dt \right) + \\ & + \left\{ \frac{dC^a}{dt} \varphi_{n_0}^a(\mathbf{r}, \mathbf{R}) + C^a \frac{dR}{dt} \frac{\partial \varphi_{n_0}^a(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{\partial R} \right\} \exp \left( -i \int_{-\infty}^t \varepsilon^a dt \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Умножим (2.33) на  $\varphi_{n_0}^s$  и проинтегрируем по координате  $\mathbf{r}$ , пользуясь ортогональностью функций  $\varphi_{n_0}^s$  и  $\varphi_{n_0}^a$ :

$$\begin{aligned} & \left\{ \frac{dC^s}{dt} + C^s \frac{dR}{dt} \left( \varphi_{n_0}^s \left| \frac{\partial \varphi_{n_0}^s}{\partial R} \right. \right) \right\} \exp \left( -i \int_{-\infty}^t \varepsilon^s dt \right) = \\ & = -C^a \frac{dR}{dt} \left( \varphi_{n_0}^s \left| \frac{\partial \varphi_{n_0}^a}{\partial R} \right. \right) \exp \left( -i \int_{-\infty}^t \varepsilon^a dt \right). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Если нуклоны находятся далеко друг от друга, то

$$\varphi_{n_0}^{s,a}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \varphi_n^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \pm \varphi_n^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \right]. \quad (2.35)$$

Учитывая (2.35), из (2.34) в нулевом приближении получаем

$$C^s = C^s(t = -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C^a = C^a(t = -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

(это соответствует электрону, находящемуся в момент времени у протона с координатой  $\mathbf{R}/2$ ).

При этих значениях  $C^s$ ,  $C^a$  из (2.32) получаем

$$\begin{aligned} \Psi |_{t \rightarrow \infty} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left( -i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^s dt \right) \times \\ & \times \frac{\varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) + \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right)}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left( -i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^a dt \right) \times \\ & \times \frac{\varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) - \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \left( \exp \left( -i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^s dt \right) + \right. \end{aligned}$$

$$+ \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^a dt\right) \varphi_{n_0}^Q\left(\mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R}\right) + \frac{1}{2} \left( \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^s dt\right) - \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon^a dt\right) \varphi_{n_0}^Q\left(\mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R}\right) \right).$$

Первое слагаемое здесь соответствует обычному рассеянию, а второе — перезарядке. Квадрат модуля коэффициента при  $\varphi_{n_0}^Q\left(\mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R}\right)$  дает вероятность перезарядки

$$W(\rho) = \left| \sin\left(\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon^a - \varepsilon^s) dt\right) \right|^2 = \left| \sin\left(\int_0^{\infty} (\varepsilon^a - \varepsilon^s) dt\right) \right|^2, \quad (2.36)$$

где  $\rho$  — прицельный параметр.

Мы считаем, что величины  $\varepsilon^a(R)$  и  $\varepsilon^s(R)$  известны из решения задачи с неподвижными ядрами. Предполагая траекторию налетающей частицы прямолинейной, заменим интегрирование по  $t$  интегрированием по  $R$ . Так как  $R^2 = \rho^2 + v^2 t^2$ , то

$$dt = \frac{1}{v} \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}}.$$

Обозначая  $\varepsilon^a(R) - \varepsilon^s(R) \equiv \Phi(R)$ , из (2.36) находим

$$W(\rho) = \left| \sin\left(\frac{1}{v} \int_{\rho}^{\infty} \Phi(R) \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}}\right) \right|^2. \quad (2.37)$$

Рассмотрим прицельные расстояния  $\rho \sim 1$ . Тогда расстояния между частицами, существенные при взаимодействии, также порядка 1. Следовательно, весь интеграл в (2.37) порядка 1. Поскольку  $v \ll 1$ , то выражение для  $W(\rho)$  сильно меняется при малом изменении  $\rho$ . Усредним (2.37) по некоторому интервалу значений  $\rho$ , малому по сравнению с  $\rho$ :

$$\overline{W} = \overline{\left| \sin\left(\frac{1}{v} \int_{\rho}^{\infty} \Phi(R) \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}}\right) \right|^2} = \frac{1}{2},$$

т. е. перезарядка будет в половине всех случаев.

Рассмотрим теперь вероятность перезарядки при  $\rho \gg 1$ . Как можно показать\*), при больших расстояниях между протонами разность энергий симметричного и антисимметричного состояний равна

$$\varepsilon^a(R) - \varepsilon^s(R) \approx \frac{4}{R \rightarrow \infty} R e^{-R}.$$

Поэтому при  $\rho \gg 1$  получаем

$$\begin{aligned} F(\rho) &\equiv \frac{1}{v} \int_{\rho}^{\infty} \Phi(R) \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - \rho^2}} = \frac{4}{ev} \int_{\rho}^{\infty} \frac{R^2 e^{-R}}{\sqrt{R^2 - \rho^2}} dR = \\ &= \frac{4\rho^2}{ev} \int_1^{\infty} \frac{x^2 e^{-\rho x}}{\sqrt{x^2 - 1}} dx \stackrel{x-1=z}{=} \frac{4\rho^2 e^{-\rho}}{ev} \int_0^{\infty} \frac{(z+1)^2 dz}{\sqrt{z(z+2)}} e^{-\rho z} \approx \\ &\approx \frac{4\rho^2}{ev} e^{-\rho} \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} z^{-1/2} e^{-\rho z} dz = \frac{4\rho^2}{ev} e^{-\rho} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\rho} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \\ &= \frac{\pi \sqrt{2}}{ev} \rho^{3/2} e^{-\rho}. \end{aligned}$$

Мы видим, что  $F(\rho) \ll 1$  при  $\rho \gg \rho_1 \sim \ln 1/v$ . Следовательно,

$$W = |\sin F(\rho)|^2 \approx F^2(\rho) = \frac{2\pi^2}{e^2 v^2} \rho^3 e^{-2\rho}.$$

Таким образом, при  $\rho \ll \rho_1$  величина  $F(\rho) \gg 1$ , а при  $\rho \gg \rho_1$  величина  $F(\rho) \ll 1$ .

Теперь оценим полное сечение перезарядки

$$\sigma = \int_0^{\infty} \sin^2 F(\rho) \cdot 2\pi\rho d\rho.$$

По порядку величины получаем

$$\sigma = \int_0^{\rho_1} \frac{1}{2} 2\pi\rho d\rho = \frac{1}{2} \pi \rho_1^2 \sim \frac{1}{2} \pi \ln^2 \frac{1}{v}. \quad (2.38)$$

Таким образом, при малых скоростях  $v$  сечение перезарядки много больше геометрического сечения.

\*) Ландау Л. Д., Лифшиц, Е. М., Квантовая механика, Физматгиз, 1963.

## 5. БЫСТРАЯ И МЕДЛЕННАЯ ПОДСИСТЕМЫ

Рассмотрим две подсистемы, одна из которых характеризуется большими, а другая — малыми частотами. Взаимодействие между подсистемами не предполагается малым. Пусть  $\xi$  — совокупность координат медленной подсистемы. Гамильтониан всей системы имеет вид

$$H = H_1(x, \xi) + H_2(\xi),$$

где  $H_1$  включает гамильтониан быстрой подсистемы и ее взаимодействие с медленной подсистемой.

В предыдущем разделе мы считали, что движение медленной подсистемы классично: мы задавали траекторию  $\xi = \xi(t)$  и вводили скорость  $\dot{\xi}$ . Теперь это не будет предполагаться.

Введем систему собственных функций гамильтониана  $H_1$ :

$$H_1(x, \xi) \varphi_n(x, \xi) = \varepsilon_n(\xi) \varphi_n(x, \xi),$$

как это делалось и ранее. Решение всей задачи

$$H\Psi_\lambda = E_\lambda\Psi_\lambda \quad (2.39)$$

ищем в виде

$$\Psi_\lambda = \sum_{n'} u_{n'\lambda}(\xi) \varphi_{n'}(x, \xi). \quad (2.40)$$

Подставляя (2.40) в (2.39), имеем

$$(H_1 + H_2) \sum_n u_{n'\lambda}(\xi) \varphi_{n'}(x, \xi) = E_\lambda \sum_n u_{n'\lambda}(\xi) \varphi_{n'}(x, \xi).$$

Умножим это равенство слева на  $\varphi_n^*(x, \xi)$  и проинтегрируем по  $x$ , пользуясь ортогональностью функций  $\varphi_n(x, \xi)$ :

$$\int \varphi_n^*(x, \xi) \varphi_{n'}(x, \xi) dx = \delta_{nn'}.$$

Получаем

$$(\varepsilon_n - E_\lambda) u_{n\lambda} + \int \varphi_n^* H_2 \sum_{n'} u_{n'\lambda} \varphi_{n'} dx = 0.$$

При этом для простоты предположено, что  $H_1$  коммутирует с  $\xi$ . Далее, так как

$$H_2 u_{n'\lambda} \varphi_{n'} = \varphi_{n'} H_2 u_{n'\lambda} + [H_2, \varphi_{n'}] u_{n'\lambda},$$

то

$$(\epsilon_n - E_\lambda) u_{n\lambda} + H_2 u_{n\lambda} = - \sum_{n'} \int \varphi_n^* [H_2, \varphi_{n'}] dx \cdot u_{n'\lambda}. \quad (2.41)$$

Это соотношение аналогично соответствующему выражению в предыдущем разделе, только  $i\hbar \frac{\partial \varphi_n}{\partial \xi} = i \frac{d\varphi_n}{dt}$  заменяется коммутатором  $[H_2, \varphi_n]$ .

В соотношении (2.41) можно перенести член с  $n' = n$  налево:

$$\begin{aligned} \left\{ H_2 - \left( E_\lambda - \epsilon_n - \int \varphi_n^* [H_2, \varphi_n] dx \right) \right\} u_{n\lambda} = \\ = - \sum_{n' \neq n} \int \varphi_n^* [H_2, \varphi_{n'}] dx \cdot u_{n'\lambda}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Это уравнение удобно для применения метода последовательных приближений. В нулевом приближении получаем уравнение

$$\{ [H_2(\xi) - [E_\lambda - \epsilon_n(\xi)]] \} u_{n\lambda}^{(0)}(\xi) = 0.$$

Мы видим, что энергия быстрой подсистемы играет роль потенциальной энергии в эффективном гамильтониане медленной подсистемы.

### Колесательные уровни энергии молекулы

Оценим энергию колебаний молекулы. Для простоты мы напишем все выражения для иона молекулы водорода, хотя результаты без труда переносятся и на более сложные молекулы. Гамильтониан иона молекулы водорода имеет вид (в атомных единицах)

$$H = -\frac{1}{2} \Delta_r - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R} - \frac{1}{M} \Delta_R.$$

Здесь  $M$  — масса протона,  $r$  — координата электрона,  $\pm \frac{1}{2} R$  — координаты протонов (рис. 21). Ядра образуют медленную подсистему, а электрон — быструю. В обозначениях

теории, развитой выше, примем за  $H_1(x, \xi)$  гамильтониан

$$H_1(r, R) = -\frac{1}{2} \Delta_r - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R}$$

и за  $H_2(\xi)$  гамильтониан

$$H_2(R) = -\frac{1}{M} \Delta_R$$

(конечно,  $1/R$  можно было бы перенести в  $H_2$ ). Введем функции  $\varphi_n(r, R)$ , удовлетворяющие уравнению

$$\begin{aligned} H_1 \varphi_n(r, R) &= \\ &= \varepsilon_n(R) \varphi_n(r, R). \end{aligned}$$

Они соответствуют собственным функциям электрона при фиксированном расстоянии между ядрами. Решение уравнения Шредингера с гамильтонианом  $H$  имеет вид (см. стр. 94)

$$\Psi_\lambda = \sum_{n\nu} C_\lambda^{n\nu} \chi_{n\nu}(R) \varphi_n(r, R), \quad (2.43)$$

причем функции  $\chi_{n\nu}$  удовлетворяют уравнению

$$\left\{ -\frac{1}{M} \Delta_R + \varepsilon_n(R) \right\} \chi_{n\nu}(R) = \omega_{n\nu} \chi_{n\nu}(R). \quad (2.44)$$

Ядра молекулы колеблются около некоторого среднего положения. Эти колебания имеют малую амплитуду. Поэтому для  $\varepsilon_n(R)$  можно написать следующее приближенное выражение:

$$\varepsilon_n(R) \approx \varepsilon_n(R_0) + \frac{1}{2} \left( \frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0} \cdot (R - R_0)^2.$$

Подставляя это  $\varepsilon_n(R)$  в уравнение (2.44), получаем уравнение Шредингера для трехмерного осциллятора. Следовательно, колебательные уровни молекулы имеют вид

$$E_\lambda = \omega_{n\nu} = \varepsilon_n(R_0) + \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \omega_0,$$

где  $\omega_0$  — частота классического осциллятора.

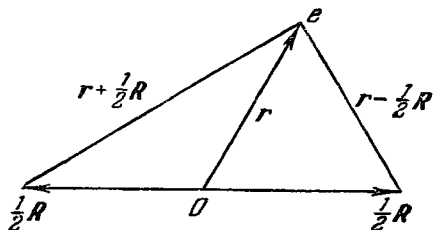


Рис. 21.



Найдем зависимость  $\omega_0$  от массы молекулы. Из соотношения

$$\frac{1}{2} M \omega_0^2 (R - R_0)^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0} \cdot (R - R_0)^2$$

вытекает, что

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{1}{M} \left( \frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0}}$$

Так как в атомных единицах электронные уровни  $\varepsilon_n \sim 1$  и размеры молекулы  $R_0 \sim 1$ , то  $\frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \sim 1$  и, следовательно,

$$\omega_0 \sim \frac{1}{\sqrt{M}}.$$

Поскольку частоты электронных переходов  $\omega_{э.д} \gg 1$ , то мы видим, что  $\omega_0 \ll \omega_{э.д}$ .

Оценим амплитуду колебаний ядер. В основном состоянии осциллятора средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают:  $\bar{T} = \bar{U} = E_0/2$  ( $E_0$  — полная энергия), т. е.

$$\frac{1}{2} \left( \frac{d^2 \varepsilon_n}{dR^2} \right)_{R=R_0} \cdot \overline{(R - R_0)^2} = \frac{1}{4} \omega_0.$$

Так как  $\omega_0 \sim 1/\sqrt{M}$ , то средняя квадратичная величина отклонения ядра от положения равновесия имеет оценку

$$\sqrt{\overline{(R - R_0)^2}} \sim \frac{1}{\sqrt[4]{M}} \ll 1.$$

Покажем, что коэффициенты  $C_{\lambda}^{n\nu}$  в выражении (2.43) для  $\Psi_{\lambda}$ , определяемые уравнением (2.42), можно вычислять методом последовательных приближений. Для этого оценим правую часть (2.42). Раскрывая коммутатор, получим члены следующего вида:

$$\left( \frac{1}{M} \chi_{n\nu} \Phi_n \left| \frac{d\Phi_{n'}}{dR} \frac{d\chi_{n'\nu'}}{dR} \right. \right), \quad \left( \frac{1}{M} \chi_{n\nu} \Phi_n \left| \frac{d^2 \Phi_{n'}}{dR^2} \chi_{n'\nu'} \right. \right),$$

(члены вида  $\left( \frac{1}{M} \chi_{n\nu} \Phi_n \left| \Phi_{n'} \frac{d^2 \chi_{n'\nu'}}{dR^2} \right. \right)$  равны нулю). Оценим производные функции  $\chi_{n\nu}$ :

$$\frac{d\chi_{n\nu}}{dR} \sim \frac{\chi_{n\nu}}{\sqrt{\overline{(R - R_0)^2}}} \sim \sqrt[4]{M} \chi_{n\nu}.$$

Поэтому из написанных двух типов членов самым большим будет первый: он порядка  $1/\sqrt[4]{M^3}$ . Итак, мы обосновали метод итераций в рассматриваемой задаче; каждая следующая итерация в  $\sqrt[4]{M^3}$  раз меньше предыдущей.

Кроме колебательных уровней, молекулы имеют также вращательные уровни. Частоты этих уровней обратно пропорциональны моменту инерции молекулы, т. е.

$$\omega_{\text{вращ}} \sim 1/M.$$

Таким образом, электронные, колебательные и вращательные частоты находятся в следующем соотношении друг к другу:

$$\omega_{\text{вращ}} : \omega_{\text{кол}} : \omega_{\text{эл}} = 1 : \sqrt{M} : M.$$

### Возбуждение ядерных дипольных уровней быстрой частицей

Рассмотрим задачу о возбуждении атомного ядра при пролете мимо него быстрой заряженной частицы. В данном случае быстрая подсистема (налетающая частица) имеет сплошной спектр, а медленная (атомное ядро) — дискретный. Найдем решение, пользуясь адиабатической теорией возмущений. Для применимости адиабатического приближения необходимо, чтобы время пролета частицы было мало по сравнению с существенными обратными частотами системы.

Сначала получим общие формулы для применения адиабатического приближения к задаче рассеяния. Введем собственные функции  $\varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i)$  гамильтониана быстрой подсистемы  $H_1 = T_r + V(\mathbf{r}, \xi_i)$ , где  $T_r$  — кинетическая энергия частицы, а  $V(\mathbf{r}, \xi_i)$  — ее взаимодействие с медленной подсистемой;  $\xi_i$  — координаты медленной,  $\mathbf{r}$  — быстрой подсистемы.

Таким образом, функции  $\varphi_p$  удовлетворяют уравнению

$$H_1 \varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i) = \varepsilon_p \varphi_p(\mathbf{r}, \xi_i). \quad (2.45)$$

Энергия частицы  $\varepsilon_p = p^2/2M$ , т. е. не зависит от  $\xi_i$ , в отличие от случая дискретного спектра.

Ищем решение (2.45), имеющее асимптотический вид:

$$\varphi_p \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \frac{f(\vartheta, \xi_i)}{r} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}. \quad (2.46)$$

Поскольку  $\varepsilon_p$  не зависит от  $\xi_i$ , то уравнение для волновой функции медленной подсистемы (т. е. для ядра) будет таким

же, как и без  $\varepsilon_p$  (только со сдвинутыми на  $\varepsilon_p$  собственными значениями):

$$H_2 \chi_n(\xi_i) = \omega_n \chi_n(\xi_i).$$

Ищем решение задачи в виде

$$\Psi_{pn} = \sum_n \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} C_{pn}^{p'n'} \Phi_{p'} \chi_{n'},$$

причем коэффициенты  $C_{pn}^{p'n'}$  подчиняются уравнению (см. (2.42))

$$(\omega_n - E_{p_0 n_0}) C_{pn}^{p'n_0} = - \sum_{n'} \int \frac{dp'}{(2\pi)^3} (\Phi_p \chi_n [H_2, \Phi_{p'}] \chi_{n'}) C_{pn}^{p'n'}.$$

Это уравнение можно решать последовательными приближениями. Пусть в начальный момент времени ( $t = -\infty$ ) система находилась в состоянии  $(p_0, n_0 \equiv 0)$ . Тогда в нулевом приближении

$$\Psi_{p_0 0}^{(0)} = C_0 \Phi_{p_0} \chi_0.$$

Точное решение должно иметь асимптотический вид:

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{1}{r} \sum_n f_n(\vartheta) e^{ip_n r} \chi_n(\xi_i).$$

Здесь импульс  $p_n$  определяется законом сохранения энергии:

$$\varepsilon_{p_n} + \omega_n = \varepsilon_{p_0} + \omega_0.$$

Пренебрегая изменением энергии частицы, получим

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{e^{ip_0 r}}{r} \sum_n f_n(\vartheta) \chi_n(\xi_i). \quad (2.47)$$

Сравним с этим выражением асимптотический вид приближенного решения  $\Psi_{p_0 0}^{(0)}$ . Согласно (2.46) имеем

$$\begin{aligned} \Psi_{p_0 0}^{(0)} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_0 \left( e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{e^{ip_0 r}}{r} f(\vartheta, \xi_i) \chi_0(\xi_i) \right) = \\ = C_0 \left( e^{ip_0 r} \chi_0(\xi_i) + \frac{e^{ip_0 r}}{r} \sum_n (\chi_n f \chi_0) \chi_n \right). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Из сравнения (2.47) и (2.48) находим  $C_0$  и амплитуды упругого и неупругого рассеяния:

$$C_0 = 1,$$

$$\begin{aligned} f_0(\vartheta) &= (\chi_0(\xi_i) | f(\vartheta, \xi_i) | \chi_0(\xi_i)), \\ f_n(\vartheta) &= (\chi_n(\xi_i) | f(\vartheta, \xi_i) | \chi_0(\xi_i)). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Используем полученные результаты для вычисления сечения возбуждения ядерных дипольных уровней быстрой заряженной частицей. Кулоновское взаимодействие пролетающей частицы с нуклонами ядра имеет вид ( $Z_1$  — заряд частицы,  $Z_2$  — заряд ядра):

$$V = Z_1 \sum_i \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} = \frac{Z_1 Z_2}{r} + Z_1 \frac{d\mathbf{r}}{r^3} + \dots,$$

где  $\mathbf{d}$  — дипольный момент ядра. Этот потенциал можно представить в виде кулоновского, но со сдвинутым началом:

$$V \approx \frac{Z_1 Z_2}{\left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right|}.$$

Для этого нужно, чтобы величина  $a = \mathbf{d}/Z_2$  была мала по сравнению с существенными  $r$ , т. е. по сравнению с прицельным параметром  $\rho$ :  $a \ll \rho$ .

Следовательно, волновые функции  $\Phi_p$  будут кулоновскими волновыми функциями со сдвинутым аргументом:

$$\Phi_p(\mathbf{r}, \xi_i) = \Phi_p^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right) \gamma(\xi_i).$$

Выберем  $\gamma(\xi_i)$  так, чтобы  $\Phi_p$  имела асимптотический вид (2.46):

$$\Phi_p(\mathbf{r}, \xi_i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \left\{ \exp \left[ i\mathbf{p} \left( \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right) \right] + \frac{f^Q(\vartheta)}{r} \exp \left[ i\mathbf{p} \left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right| \right] \right\} \gamma(\xi_i),$$

где  $f^Q$  — амплитуда кулоновского рассеяния. Для совпадения с (2.46) следует взять  $\gamma(\xi_i) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{d}/Z_2}$ . Тогда

$$\Phi_p(\mathbf{r}, \xi_i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{r} f^Q(\vartheta) \exp \left[ i\mathbf{p} \left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right| + i\mathbf{p} \mathbf{d} \frac{1}{Z_2} - i\mathbf{p}\mathbf{r} \right].$$

Так как  $\left| \mathbf{r} - \frac{1}{Z_2} \mathbf{d} \right| \approx r - \frac{1}{Z_2} \frac{d\mathbf{r}}{r}$ , то

$$\Phi_p(\mathbf{r}, \xi_i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} + \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{r} f^Q(\vartheta) \exp \left[ i\mathbf{q} \mathbf{d} \frac{1}{Z_2} \right],$$

где  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p} - \frac{\mathbf{p}}{r} \mathbf{r}$  — вектор, характеризующий изменение импульса налетающей частицы при столкновении.

Поэтому согласно (2.49)

$$f_n(\vartheta) = f^Q(\vartheta) \left( \chi_n \left| \exp \left( i q d \frac{1}{Z_2} \right) \right| \chi_0 \right). \quad (2.50)$$

Здесь  $f^Q$  — амплитуда кулоновского рассеяния.

Заметим, что сумма сечений для всех возбуждений равна

$$\begin{aligned} \sum_n |f_n(\vartheta)|^2 &= \sum_n \left( \chi_0 \left| \exp \left( -i q d \frac{1}{Z_2} \right) \right| \chi_n \right) \times \\ &\quad \times \left( \chi_n \left| \exp \left( i q d \frac{1}{Z_2} \right) \right| \chi_0 \right) |f^Q(\vartheta)|^2 = |f^Q(\vartheta)|^2, \end{aligned}$$

т. е. равна сечению кулоновского рассеяния.

Если угол отклонения  $\vartheta$  мал (малый переданный импульс), то из (2.50) получаем формулу теории возмущений:

$$f_n(\vartheta) \approx f^Q(\vartheta) \left( \chi_n \left| \frac{i}{Z_2} q d \right| \chi_0 \right), \quad (2.51)$$

амплитуда возбуждения пропорциональна дипольному матричному элементу.

### Рассеяние протона на атоме водорода (перезарядка)

Рассмотрим рассеяние протона на атоме водорода, когда скорость протона много меньше скорости атомного электрона. В противоположность предыдущему случаю здесь дискретна быстрая подсистема, а у медленной подсистемы непрерывный спектр. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = T_r - \frac{1}{\left| r - \frac{1}{2} R \right|} - \frac{1}{\left| r + \frac{1}{2} R \right|} + \frac{1}{R} - \frac{1}{M} \Delta_R.$$

В разделе 2.4 мы рассматривали  $R$  как заданную функцию времени. Теперь мы рассматриваем налетающий протон и атом водорода как две взаимодействующие квантовомеханические системы.

Гамильтониан  $H$  симметричен к перестановке налетающей и покоящейся частиц ( $r \rightarrow -r$ ). Поэтому можно ввести симметричные и антисимметричные функции  $\varphi_n^s(r, R)$  и  $\varphi_n^a(r, R)$ . Если нуклоны находятся далеко друг от друга, то электрон может находиться около одного либо около другого

протона, и, следовательно,

$$\varphi_n^{s,a}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \varphi_n^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \pm \varphi_n^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \right],$$

где в правой части стоят волновые функции атома водорода.

Предположим, что при сближении ядер не происходит пересечения термов. Тогда можно классифицировать их по тем состояниям, из которых они образовались.

Будем считать, что сначала электрон был около протона с координатой  $\mathbf{R}/2$ , т. е. его волновая функция имеет вид

$$\varphi = \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right).$$

Гамильтониан медленной подсистемы равен

$$H_2(\mathbf{R}) = -\frac{1}{M} \Delta_{\mathbf{R}},$$

а его собственные функции находятся из уравнения

$$\left[ -\frac{1}{M} \Delta_{\mathbf{R}} + \varepsilon_n^{s,a}(\mathbf{R}) \right] \chi_{pn}^{s,a}(\mathbf{R}) = E_p \chi_{pn}^{s,a}(\mathbf{R})$$

и имеют асимптотический вид

$$\chi_{pn}^{s,a}(\mathbf{R}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}} + \frac{f_n^{s,a}}{R} e^{i\mathbf{p}\mathbf{R}}.$$

В нулевом приближении решение задачи имеет вид (см. стр. 94)

$$\Psi_{\lambda} = C_{np}^{\lambda s} \varphi_n^s(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \chi_{pn}^s(\mathbf{R}) + C_{np}^{\lambda a} \varphi_n^a(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \chi_{pn}^a(\mathbf{R}). \quad (2.52)$$

Коэффициенты  $C_{np}^{\lambda s}$  и  $C_{np}^{\lambda a}$  определяются из асимптотического вида  $\Psi_{\lambda}$ :

$$\Psi_{\lambda} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) e^{i\mathbf{p}_0 \mathbf{R}} + \left[ f_1 \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) + f_2 \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \right] \frac{e^{i\mathbf{p}_0 \mathbf{R}}}{R}, \quad (2.53)$$

где  $f_1$  — амплитуда упругого рассеяния, а  $f_2$  — амплитуда перезарядки.

Чтобы обеспечить асимптотический вид (2.53), нужно считать в (2.52)  $p = p_0$  и  $n = n_0$ . Тогда волновая функция

(2.52) становится равной

$$\Psi_\lambda = C^s \varphi_{n_0}^s(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \chi_{p_0 n_0}^s(\mathbf{R}) + C^a \varphi_{n_0}^a(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \chi_{p_0 n_0}^a(\mathbf{R})$$

и имеет асимптотический вид

$$\Psi_\lambda \xrightarrow{R \rightarrow \infty} e^{i p_0 R} (C^s \varphi_{n_0}^s + C^a \varphi_{n_0}^a) + \frac{1}{R} e^{i p_0 R} (f^s C^s \varphi_{n_0}^s + f^a C^a \varphi_{n_0}^a). \quad (2.54)$$

Выражения (2.53) и (2.54) должны совпадать, т. е. нужно потребовать

$$C^s = C^a = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Тогда из (2.54) находим

$$\begin{aligned} \frac{f^s \varphi_{n_0}^s + f^a \varphi_{n_0}^a}{\sqrt{2}} &= \frac{1}{2} \left\{ f^s \left[ \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) + \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \right] + \right. \\ &+ f^a \left[ \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) - \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) \right] \left. \right\} = \\ &= f_1 \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{R} \right) + f_2 \varphi_{n_0}^Q \left( \mathbf{r} + \frac{1}{2} \mathbf{R} \right), \end{aligned}$$

т. е.

$$f_1 = \frac{f^s + f^a}{2}, \quad f_2 = \frac{f^s - f^a}{2}. \quad (2.55)$$

Таким образом, для нахождения амплитуды перезарядки  $f_2$  и амплитуды упругого рассеяния  $f_1$  необходимо вычислить амплитуды  $f^s$  и  $f^a$ . Чтобы найти их, нужно решить уравнение

$$\left[ -\frac{1}{M} \Delta_R + \varepsilon_n^{s,a}(\mathbf{R}) \right] \chi_{pn}^{s,a} = E_p \chi_{pn}^{s,a}$$

с величинами  $\varepsilon_n^{s,a}(\mathbf{R})$ , которые определяются из решения задачи об электроны в поле двух центров. В дальнейшем (стр. 151) мы найдем решение этой задачи в квазиклассическом приближении.

### Рождение мягких квантов при рассеянии («инфракрасная катастрофа»)

Рассмотрим задачу о рождении мягких квантов при рассеянии частицы на ядре. Будем предполагать частицу нерелятивистской. Гамильтониан системы имеет вид

$$H = T + V - \frac{1}{c} \mathbf{p} \mathbf{A} + H_Y. \quad (2.56)$$

Здесь  $T$  — кинетическая энергия частицы,  $V$  — рассеивающий потенциал,  $-\frac{1}{c} \mathbf{p} \mathbf{A}$  — взаимодействие частицы с полем квантов,  $H_\gamma$  — гамильтониан поля квантов.

Предположим, что энергия квантов много меньше энергии частицы. Тогда движение частицы можно считать заданным и рассматривать только ту часть гамильтониана, которая содержит операторы, действующие на  $\psi$ -функцию квантов. Гамильтониан  $\gamma$ -квантов за время столкновения, которое будем считать малым, меняется от величины  $H_0 = H_\gamma - \frac{1}{c} \mathbf{p}_0 \mathbf{A}$  до столкновения к величине  $H_1 = H_\gamma - \frac{1}{c} \mathbf{p}_1 \mathbf{A}$  после столкновения. Перейдем в систему координат, в которой частица до рассеяния покоилась. Тогда

$$H_0 = H_\gamma, \quad H_1 = H_\gamma - \frac{1}{c} \mathbf{q} \mathbf{A}, \quad (2.57)$$

где  $\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0$  — изменение импульса частицы в результате столкновения.

Возмущение  $-\frac{1}{c} \mathbf{q} \mathbf{A}$  для малых частот становится большим, так как  $A_{k\omega} \sim 1/\sqrt{\omega}$ . Поэтому мы не будем пользоваться теорией возмущений, а используем только внезапность изменения гамильтониана  $\gamma$ -квантов.

Введем собственные функции  $\chi_n$  гамильтониана  $H_0$  и  $\chi'_n$  гамильтониана  $H_1$ . Предположим, что до столкновения система  $\gamma$ -квантов находилась в состоянии  $\chi_0$ . Ввиду внезапности столкновения волновая функция системы  $\chi_0$  практически не изменяется. Следовательно, амплитуда перехода в состояние  $\chi'_n$  равна  $(\chi'_n | \chi_0)$  (см. стр. 75).

Представим гамильтониан электромагнитного поля, равный

$$H_\gamma = \int \left( \frac{1}{8\pi c^2} \dot{\mathbf{A}}^2 + \frac{1}{8\pi} (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right) d\mathbf{r}, \quad (2.58)$$

в виде суммы гамильтонианов отдельных осцилляторов поля. Для этого запишем векторный потенциал  $\mathbf{A}$  в виде

$$\mathbf{A} = \sum_{k\lambda} \sqrt{2\pi c^2} \boldsymbol{\eta}_{k\lambda} (q_{k\lambda} \exp(ikr - i\omega_{k\lambda}t) + q_{k\lambda}^* \times \\ \times \exp(-ikr + i\omega_{k\lambda}t)). \quad (2.59)$$



Здесь  $k$  — волновой вектор,  $\lambda$  — поляризация,  $\omega_{k\lambda}$  — энергия квантов,  $\eta_{k\lambda}$  — единичный вектор поляризации. Обозначая

$$q = Q + \frac{i}{\omega} P, \quad q^* = Q - \frac{i}{\omega} P$$

и подставляя в  $H_\gamma$ , получим

$$H_\gamma = \sum_{k\lambda} \frac{1}{2} (P^2 + \omega^2 Q^2)_{k\lambda}. \quad (2.60)$$

В случае мягких квантов экспоненту  $e^{ikr}$  можно заменить единицей. Будем считать временные множители  $\exp(\pm i\omega_{k\lambda} t)$  включенными в  $q_{k\lambda}$ ,  $q_{k\lambda}^*$ . Опустим далее для простоты индексы  $k\lambda$  при  $q_{k\lambda}$ ,  $q_{k\lambda}^*$ . Тогда

$$A = \sum V \sqrt{2\pi c^2} \eta \cdot 2Q.$$

Гамильтониан квантов  $H_1$  имеет вид

$$H_1 = \sum \left\{ \frac{1}{2} (P^2 + \omega^2 Q^2) - 2\sqrt{2\pi} (\eta q) Q \right\}. \quad (2.61)$$

Представим его в виде суммы осцилляторных гамильтонианов со смещенной координатой:

$$H_1 = \sum \left\{ \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} \omega^2 (Q - \delta)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \delta^2 \right\}, \quad (2.62)$$

где  $\delta = \frac{2\sqrt{2\pi}}{\omega^2} (\eta q)$ . Следовательно, волновые функции после столкновения  $\chi_n(Q)$  имеют вид осцилляторных функций, но со смещенной координатой:

$$\chi_n(Q) = \chi_n(Q - \delta).$$

Таким образом, амплитуда перехода в состояние  $\chi_n$  имеет вид

$$C_n = \int \chi_n(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ. \quad (2.63)$$

Рассмотрим сначала два предельных случая — малые и большие  $\delta$  по сравнению с амплитудой нулевых колебаний. Если  $\delta$  мало, то из (2.63) следует

$$C_n \approx -\delta \int \frac{\partial \chi_n}{\partial Q} \chi_0 dQ = i\delta (P)_{0n}, \quad (2.64)$$

где  $P$ —оператор импульса. Он имеет отличные от нуля матричные элементы лишь для изменения числа квантов на единицу:  $(P)_{01} = \frac{1}{2} \sqrt{\omega}$ . Поэтому вероятность испускания одного кванта равна  $w_1 = \frac{1}{4} \omega \delta^2 = \frac{2\pi}{\omega^3} (\eta q)^2$ . Эта формула совпадает с результатом обычной теории возмущений.

Оценим матричный элемент  $C_n = \int \chi_n(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ$ , когда смещение  $\delta$  много больше амплитуды колебаний осциллятора. Для этого воспользуемся квазиклассическим выражением для функции  $\chi_n$  (см. 1.1 и 3.1):

$$\chi_n(Q) = \frac{a_n}{\sqrt[4]{E_n - 1/2 Q^2}} \cos\left(\int \sqrt{E_n - 1/2 Q^2} dQ - \frac{\pi}{4}\right).$$

Для простоты здесь частота осциллятора  $\omega$  взята равной единице. Результаты легко переносятся на случай  $\omega \neq 1$ . Нормировочный множитель  $a_n$  порядка единицы. Действительно,

$$1 = \int \chi_n^2 dQ \sim \frac{a_n^2}{\sqrt{E_n}} l_n \sim \frac{a_n^2}{\sqrt{E_n}} \frac{\sqrt{E_n}}{\omega}.$$

Поэтому

$$C_n \sim \int \frac{\exp(-Q^2)}{\sqrt[4]{E_n - 1/2(Q - \delta)^2}} \times \\ \times \cos\left(\int \sqrt{E_n - \frac{1}{2}(Q - \delta)^2} dQ - \frac{\pi}{4}\right) dQ. \quad (2.65)$$

Так как величина  $\delta$ , по предположению, много больше амплитуды нулевых колебаний, то можно под знаком корня в (2.65) пренебречь членом  $Q^2/2$ . Обозначим  $E_n - \delta^2/2 \equiv \Delta E$  и заменим переменную интегрирования  $Q$ :  $\Delta E/\delta + Q = x$ . Тогда из (2.65) находим:

$$C_n \sim \int_0^{\infty} \frac{\cos(\delta^{1/2} x^{3/2})}{\sqrt[4]{\delta x}} \exp\left(-x^2 + 2x \frac{\Delta E}{\delta}\right) dx \exp\left[-\left(\frac{\Delta E}{\delta}\right)^2\right]. \quad (2.66)$$

Значения  $x$ , существенные в этом интеграле, соответствуют аргументу косинуса порядка единицы, т. е. имеют порядок

величины  $x \sim \delta^{-1/2}$ . Поэтому

$$C_n \sim \frac{1}{\sqrt[4]{\delta}} \frac{1}{\sqrt[12]{\delta}} \delta^{-1/3} \exp \left[ - \left( \frac{\Delta E}{\delta} \right)^2 \right] \sim \frac{1}{\sqrt{\delta}} \exp \left[ - \left( \frac{\Delta E}{\delta} \right)^2 \right],$$

$$|C_n|^2 \sim \frac{1}{\delta} \exp \left[ - 2 \left( \frac{\Delta E}{\delta} \right)^2 \right].$$

Таким образом, распределение вероятности испускания квантов имеет вид гауссовой кривой с максимумом  $w_{\max} \sim 1/\delta$  и шириной  $\Delta E \sim \delta$  около значения  $E = \delta^2/2$ . Это значение, как нетрудно видеть, совпадает с энергией классического осциллятора, начало координат которого внезапно сдвинуто на величину  $\delta$ .

Теперь перейдем к вычислению  $C_n$  для произвольных  $\delta$ . Вычислим сначала вероятность того, что не будет рождено ни одного кванта данного типа, т. е.

$$w_0 = \left| \int \chi_0(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ \right|^2.$$

Так как волновая функция основного состояния осциллятора имеет вид

$$\chi_0(Q) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi}} \exp \left( - \frac{1}{2} \omega Q^2 \right),$$

то

$$w_0 = \left| \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left( - \omega Q^2 - \frac{1}{2} \omega \delta^2 + \omega Q \delta \right) dQ \right|^2 =$$

$$= \exp \left( - \frac{1}{4} \omega \delta^2 \right) = \exp \left[ - \frac{2\pi}{\omega^3} (q\eta)^2 \right]. \quad (2.67)$$

Восстановим теперь значки  $k, \lambda$ . Тогда

$$w_0^{k\lambda} = \exp \left[ - \frac{2\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2 \right]$$

— вероятность того, что не будет излучен ни один квант  $k, \lambda$ .

Вероятность того, что вообще не родится ни одного кванта ни в каком состоянии, равна

$$W_0 = \prod_{k\lambda} w_0^{k\lambda} = \exp \left[ - \sum_{k\lambda} \frac{2\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2 \right].$$

Для вычисления  $W_0$  нужно найти сумму

$$\sum_{k\lambda} \frac{2\pi}{\omega^3_{k\lambda}} (q\eta_{k\lambda})^2 = \sum_{\lambda} 2\pi (q\eta_{k\lambda})^2 \int \frac{\omega^2 d\omega d\Omega}{(2\pi)^3 c^3 \omega^3}. \quad (2.68)$$

Мы видим, что при малых частотах это выражение логарифмически расходится. Следовательно,  $W_0 = 0$ , т. е. любое торможение всегда будет сопровождаться излучением мягких квантов.

Вычислим матричный элемент  $C_n = \int \chi_n(Q - \delta) \chi_0(Q) dQ$  для произвольных  $n$ . Осцилляторная волновая функция  $\chi_n(Q)$  имеет вид

$$\chi_n(Q) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{1}{2} \omega Q^2\right) H_n(\sqrt{\omega} Q),$$

где  $H_n$  — полиномы Эрмита. Поэтому

$$C_n = \frac{\sqrt{\omega}}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \int \exp\left[-\frac{1}{2} \omega Q^2 - \frac{1}{2} \omega (Q - \delta)^2\right] H_n(\sqrt{\omega} Q) dQ.$$

Этот интеграл легко вычислить, используя производящие функции полиномов Эрмита

$$\exp(-t^2 + 2t\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\xi).$$

В результате получается

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2\right), \quad (2.69)$$

где

$$\alpha^2 = \frac{1}{4} \omega \delta^2 = \frac{2\pi}{\omega^3} (q\eta)^2.$$

Вероятность испускания квантов с различными  $k\lambda$  равна произведению квадратов выражений вида (2.69), т. е.

$$W = \exp\left[-\sum_{k\lambda} \alpha_{k\lambda}^2\right] \prod_{k\lambda} \frac{(\alpha_{k\lambda})^{2n_{k\lambda}}}{(n_{k\lambda})!}.$$

Найдем среднее число квантов, излученных при торможении:

$$\begin{aligned} \bar{n}_{k\lambda} &= \sum_{n_{k\lambda}} n_{k\lambda} w_n^{k\lambda} = \exp[-\alpha_{k\lambda}^2] \sum_{n_{k\lambda}} \frac{(\alpha_{k\lambda})^{2n_{k\lambda}}}{(n_{k\lambda})!} n_{k\lambda} = \\ &= \exp[-\alpha_{k\lambda}^2] \sum_{n_{k\lambda}} \frac{\alpha_{k\lambda}^2}{(n_{k\lambda}-1)!} (\alpha_{k\lambda})^2 (n_{k\lambda}-1) = \alpha_{k\lambda}^2 = \frac{2\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2. \end{aligned}$$

Таким образом, для вероятности испускания  $n$  квантов типа  $k, \lambda$  мы получаем следующую формулу:

$$w_n^{k\lambda} = \frac{(\bar{n}_{k\lambda})^{n_{k\lambda}}}{(n_{k\lambda})!} \exp(-\bar{n}_{k\lambda}), \quad (2.70)$$

которая совпадает с распределением Пуассона.

Вероятность испускания одного кванта данного типа, как видно из (2.70), равна

$$w_1^{k\lambda} = \bar{n}_{k\lambda} \exp(-\bar{n}_{k\lambda}).$$

При  $\bar{n}_{k\lambda} \ll 1$  получаем  $w_1^{k\lambda} \approx \bar{n}_{k\lambda}$ . Это выражение совпадает с результатом обычной теории возмущений.

Из (2.68) мы видим, что сечение чисто упругого рассеяния строго равняется нулю. На опыте под упругим рассеянием понимают рассеяние, при котором энергия излученных квантов меньше некоторой величины  $E_1$ , которая определяется точностью измерения. Наблюдаемое сечение рассеяния равно

$$\sigma_{\text{набл}} = \sigma_0 W'_0.$$

Здесь  $\sigma_0$  — вычисленное сечение упругого рассеяния без учета излучения,  $W'_0$  — вероятность того, что не излучено ни одного кванта с энергией, большей  $E_1$ . Как мы видели,

$$\begin{aligned} W'_0 &= \exp \left[ - \int_{E_1}^E \frac{2\pi}{\omega^3} (q\eta_{k\lambda})^2 \frac{\omega^2 d\omega}{c^3 (2\pi)^3} \right] = \\ &= \exp \left[ - 2\pi \frac{2}{3} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{q^2}{c^3} \ln \frac{E}{E_1} \right]. \quad (2.71) \end{aligned}$$

В качестве верхнего предела мы взяли энергию электрона, хотя предположение о мягкости квантов нарушается уже при меньших энергиях. Если  $\ln(E/E_1)$  достаточно велико, то это внесет малую ошибку.

Сечение излучения произвольного числа квантов любого типа равно

$$\sigma = \sigma_0 \sum_n W_n = \sigma_0.$$

Если бы мы пользовались теорией возмущений, то получилось бы

$$w_1^{k\lambda} = \frac{2\pi}{\omega_{k\lambda}^3} (q\eta_{k\lambda})^2,$$

$$W_1 = \sum_{k\lambda} w_1^{k\lambda} = \frac{2\pi \cdot 2q^2}{(2\pi)^3 c^3} \int_0^E \frac{d\omega}{\omega},$$

т. е. выражение, расходящееся на нижнем пределе. Эта расходимость, связанная с незаконным применением теории возмущений, называется инфракрасной расходимостью («инфракрасной катастрофой»).

## 6. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ В СЛУЧАЕ БЛИЗКИХ УРОВНЕЙ

Рассмотрим систему с двумя близкими уровнями, на которую наложено возмущение (случай большего числа близких уровней внесет лишь алгебраические усложнения). Пусть возмущение достаточно мало, так что можно пренебречь примесью состояний с далекими энергиями, между тем как состояния с близкими энергиями смешиваются сильно.

Решение уравнения Шредингера

$$(H_0 + H') \Psi = E\Psi,$$

где  $H'$  — возмущение, следует искать в виде суперпозиции состояний, соответствующих близким уровням:

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2, \quad (2.72)$$

причем функции  $\Psi_{1,2}$  удовлетворяют невозмущенному уравнению

$$H_0 \Psi_{1,2} = \varepsilon_{1,2} \Psi_{1,2}.$$

Коэффициенты  $C_1, C_2$  в (2.72) имеют одинаковый порядок величины.

Найдем энергетические уровни возмущенной системы. Для этого запишем уравнение Шредингера в представлении  $C_1, C_2$ :

$$\left. \begin{aligned} (E - \varepsilon_1) C_1 &= H'_{11} C_1 + H'_{12} C_2, \\ (E - \varepsilon_2) C_2 &= H'_{21} C_1 + H'_{22} C_2. \end{aligned} \right\} \quad (2.73)$$

Коэффициенты  $C_1, C_2$  отличны от нуля, если детерминант системы (2.73) равен нулю, т. е.

$$\begin{vmatrix} E - \varepsilon_1 - H'_{11} & -H'_{12} \\ -H'_{21} & E - \varepsilon_2 - H'_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.74)$$

Из (2.74) получаем

$$(E - \varepsilon_1 - H'_{11})(E - \varepsilon_2 - H'_{22}) - |H'_{12}|^2 = 0,$$

откуда

$$E = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + H'_{11} + H'_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + H'_{11} + H'_{22})^2}{4} - (\varepsilon_1 + H'_{11})(\varepsilon_2 + H'_{22}) + |H'_{12}|^2}.$$

Обозначая  $\varepsilon_1 + H'_{11} = \tilde{\varepsilon}_1$ ,  $\varepsilon_2 + H'_{22} = \tilde{\varepsilon}_2$ , окончательно находим

$$E = \frac{\tilde{\varepsilon}_1 + \tilde{\varepsilon}_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2)^2 + 4 |H'_{12}|^2}. \quad (2.75)$$

В случае применимости обычной теории возмущений:  $|H'_{12}| \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$ , из (2.75) получаем

$$E \approx \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\varepsilon}_1 + \tilde{\varepsilon}_2 \pm \left[ (\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2) + \frac{2 |H'_{12}|^2}{\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2} \right] \right\},$$

или

$$\begin{aligned} E^{(1)} &\approx \varepsilon_1 + H'_{11} + \frac{|H'_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}, \\ E^{(2)} &\approx \varepsilon_2 + H'_{22} - \frac{|H'_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}, \end{aligned}$$

что и следовало ожидать. При  $H' \rightarrow 0$  величина  $E^{(1)} \rightarrow \varepsilon_1$ , а  $E^{(2)} \rightarrow \varepsilon_2$ . Наоборот, в случае  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$  из (2.75) имеем

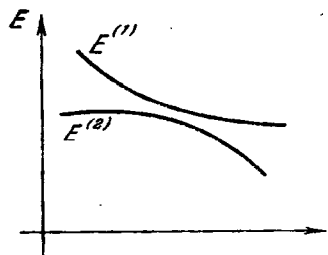


Рис. 22.

$$E = \varepsilon + \frac{H'_{11} + H'_{22}}{2} \pm |H'_{12}|. \quad (2.76)$$

Заметим, что если для какого-либо возмущения, зависящего от параметра,  $H'_{12} \neq 0$ , то уровни  $E^{(1)}$  и  $E^{(2)}$ , как функции параметра  $\xi$ , не пересекаются, так как в (2.75)

$\sqrt{(\tilde{\varepsilon}_1 - \tilde{\varepsilon}_2)^2 + 4|H'_{12}|^2} > 0$ . Уровни энергии при этом имеют вид, изображенный на рис. 22.

### Частица в периодическом потенциале

Рассмотрим, как изменяется движение свободной частицы при наложении периодического возмущения

$$V = V_0 (e^{ikx} + e^{-ikx}).$$

Волновая функция невозмущенной задачи имеет вид  $\Psi_p = e^{ipx}$ . Среднее значение  $V$  по любому невозмущенному состоянию равно нулю, а отличны от нуля лишь матричные элементы  $V_{p, p-k} = V_{p, p+k} = V_0$  (длину ямы считаем равной 1). В обычной теории возмущений сдвиг энергетических уровней равен

$$E_p = \varepsilon_p + \frac{V_0^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}} + \frac{V_0^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_{p+k}},$$

где  $\varepsilon_p = p^2/2M$ . Однако это выражение применимо лишь в случае  $V_0 \ll |\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}|$ , т. е. когда  $p$  не близко к  $\pm k/2$ .

Если  $p \rightarrow k/2$ , то состояния  $\Psi_p$  и  $\Psi_{p-k}$  имеют близкие энергии, и волновую функцию частицы нужно искать в виде

$$\Psi = C_1 \Psi_p + C_2 \Psi_{p-k}$$

(при  $p \rightarrow -k/2$   $\Psi = C_1 \Psi_p + C_2 \Psi_{p+k}$ ). Из (2.75) для



собственных значений энергии получаем выражение:

$$E_p = \frac{\varepsilon_p + \varepsilon_{p-k}}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k})^2}{4} + V_0^2}. \quad (2.77)$$

Выбор знака в (2.77) определяется тем условием, чтобы при  $|\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}| \gg V_0$  энергия  $E_p$  стремилась к  $\varepsilon_p$ . Так как при  $p < k/2$  величина  $\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k})^2} = |\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}| = \varepsilon_{p-k} - \varepsilon_p$ , а при  $p > k/2$   $\sqrt{(\varepsilon_p - \varepsilon_{p-k})^2} = \varepsilon_p - \varepsilon_{p-k}$ , то для  $p < k/2$  в (2.77) нужно взять один знак корня, а при  $p > k/2$  — другой. Для  $E_p$  получается разрывная кривая, изображенная на рис. 23. При этом величина разрыва равна  $E_{k/2+0} - E_{k/2-0} = 2V_0$ .

Таким образом, при наложении периодического потенциала в спектре свободных частиц появляется щель. Отсюда понятно возникновение запрещенных зон в металлах для электронов (правда, там нужно рассматривать трехмерный случай).

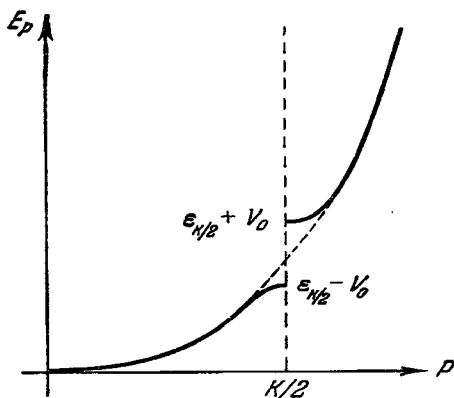


Рис. 23.

Из (2.77) следует, что  $\left. \frac{dE}{dp} \right|_{p=k/2} = 0$ , т. е. групповая скорость частицы на краю зоны ( $p = k/2$ ) равна нулю. Это соответствует тому, что на краю зоны волновая функция частицы есть стоячая, а не бегущая волна.

### Штарк-эффект в случае близких уровней

Рассмотрим систему с двумя близкими уровнями, на которую наложено однородное электрическое поле  $V(x) = -\mathcal{E}x$ . Определим, как изменяется энергия системы в этом поле. Среднее значение  $V$  по любому состоянию с определенной четностью равно нулю (дипольный момент  $d_x = \int \Psi_\lambda^*(r) x \Psi_\lambda(r) dr$  при замене переменной интегрирования  $r \rightarrow -r$  переходит в  $-d_x$ , т. е.  $d_x = 0$ ).

Для энергетических уровней системы в поле  $E_{1,2}$  получаем:

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2}{4} + |V_{12}|^2}. \quad (2.78)$$

Рассмотрим, например, состояния  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$  атома водорода. Они обладают одинаковой энергией (если не учитывать лэмбовского смещения). Расщепление такого дублетного уровня при наложении электрического поля линейно по полю и равно  $E_2 - E_1 = 2|V_{12}|$ .

Вычислим  $V_{12}$ . Для состояния  $2s_{1/2}$  волновая функция равна  $R_{20}(r) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ , а для состояния  $2p_{1/2}$  равна  $R_{21} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ .  $R_{nl}(r)$  — радиальные кулоновские функции. Следовательно,  $V_{12} = -\mathcal{E} (R_{20} | r | R_{21}) \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \int \cos^2 \theta d\Omega = -\frac{\mathcal{E}}{\sqrt{3}} (R_{20} | r | R_{21})$ .

Матричные элементы дипольного момента для кулоновских радиальных функций табулированы. В частности,  $(R_{20} | r | R_{21}) = 3\sqrt{3}$ . Следовательно,  $|V_{12}| = 3\mathcal{E}$ .

Итак, расщепление дублета  $2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$  в слабом электрическом поле в атомных единицах равно  $6\mathcal{E}$ .

Заметим, что уровень  $2p_{3/2}$  имеет ту же четность, что и  $2p_{1/2}$ . Поэтому  $\int \Psi_{2p_{3/2}} x \Psi_{2p_{1/2}} dr = 0$ . Следовательно, эти уровни в нашем линейном по полю приближении не расщепляются. Для их расщепления нужно рассматривать суперпозицию трех состояний —  $2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}$ ,  $2p_{3/2}$ .

Для всех других атомов, кроме атома водорода, расщепление термов квадратично по полю:  $E = E_0 + \frac{1}{2} \alpha \mathcal{E}^2$ . Действительно, уровни сложных атомов не вырождены относительно орбитального квантового числа  $l$ , т. е. нет состояний с близкими энергиями, которые перемешивались бы в слабом электрическом поле.

### Изменение времени жизни состояния $2s_{1/2}$ атома водорода во внешнем электрическом поле

В атоме водорода состояние  $2s_{1/2}$  имеет большое время жизни. Действительно, переход  $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  может происходить лишь с испусканием двух  $\gamma$ -квантов. Время жизни

состояния  $2s_{1/2}$  по отношению к этому переходу порядка  $1/7$  сек. Кроме того, возможен еще дипольный переход  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  (энергии обоих состояний различаются из-за лэмбовского смещения). Оценим вероятность этого перехода.

В (1.4) мы нашли, что вероятность дипольного перехода  $\omega \sim \omega^3/c^3$ , где  $\omega$  — частота перехода. Разность энергий  $\omega = E_{2s_{1/2}} - E_{2p_{1/2}}$  имеет порядок  $1/c^3$  (см. стр. 63). Следовательно,  $\omega \sim 1/c^{12}$ . В атомных единицах  $c \approx 137$ , следовательно,  $\omega \sim 10^{-24}$ , т. е. время жизни состояния  $2s_{1/2}$  по отношению к переходу  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$  порядка  $10^{24} \tau_{\text{ат}}$ , где  $\tau_{\text{ат}}$  — атомное время  $\sim 10^{-16}$  сек. Итак, рассматриваемое время  $\sim 10^8$  сек. Мы видим, что переход  $2s_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$  все же вероятнее, чем переход  $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ .

При наложении внешнего поля состояние атома будет суперпозицией состояний  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$ . Но как только атом перейдет в состояние  $2p_{1/2}$ , он моментально (за время  $\tau \sim 10^{-9}$  сек) совершит дипольный переход:  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2}$ . Мы видим, что время жизни состояния  $2s_{1/2}$  резко изменится при наложении электрического поля. Итак, будем считать  $\Psi = C_1 e^{-i\varepsilon_1 t} \psi_1 + C_2 e^{-i\varepsilon_2 t} \psi_2$ , где индекс 1 соответствует состоянию  $2s_{1/2}$ , а индекс 2 —  $2p_{1/2}$ . Для величин  $C_1$ ,  $C_2$  имеем уравнения

$$\left. \begin{aligned} i\dot{C}_1 &= V_{12} C_2 \exp [i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) t], \\ i\dot{C}_2 &= -i\frac{1}{\tau} C_2 + V_{21} C_1 \exp [-i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) t]. \end{aligned} \right\} \quad (2.79)$$

Здесь  $V = -\mathcal{E}x$ . Матричные элементы  $V_{11} = V_{22} = 0$ . Затухания состояния  $2s_{1/2}$  со временем  $\sim 1/7$  сек не учитываем.

Даже в отсутствие внешнего поля  $C_2$  не является постоянной:  $C_2^{(0)} \sim \exp(-t/\tau)$  из-за взаимодействия с полем излучения. Здесь  $\tau$  имеет порядок времени жизни дипольного состояния ( $\tau \sim 10^{-9}$  сек).  $C_1^{(0)}$  считаем постоянной, поскольку время затухания состояния  $2s_{1/2}$  очень велико.

Обозначим  $C \equiv C_2 \exp(i\varepsilon_{12} t)$ , где  $\varepsilon_{12} \equiv \varepsilon_1 - \varepsilon_2$  — лэмбовское смещение. Тогда из (2.79) имеем:

$$i\dot{C}_1 = V_{12} C, \quad i\dot{C} = V_{21} C_1 - (\varepsilon_{12} + i/\tau) C. \quad (2.80)$$

Исключая  $C_1$ , получаем  $\ddot{C} + \left(-i\varepsilon_{12} + \frac{1}{\tau}\right) \dot{C} + |V_{12}|^2 C = 0$ .

Ищем решение уравнения в виде  $C = Ae^{i\omega t}$ . Тогда получаем

$$\omega^2 - \omega \left( \frac{i}{\tau} + \varepsilon_{12} \right) - |V_{12}|^2 = 0, \quad (2.81)$$

что дает два комплексных корня для  $\omega$ , причем  $\varepsilon_{12} \sim 1/\tau$ .

В начальный момент времени  $C_1(t=0) = 1$ ,  $C(t=0) = 0$ . Начальное условие для  $C$  будет выполнено, если искать  $C$  в виде  $C = a [\exp(i\omega^{(1)}t) - \exp(i\omega^{(2)}t)]$ . Из (2.80) находим

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{i\dot{C} + (\varepsilon_{12} + i/\tau)C}{V_{21}} = \\ &= \frac{a}{V_{21}} \left\{ \left( \frac{i}{\tau} + \varepsilon_{12} - \omega^{(1)} \right) \exp(i\omega^{(1)}t) + \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{i}{\tau} - \varepsilon_{12} + \omega^{(2)} \right) \exp(i\omega^{(2)}t) \right\}. \end{aligned}$$

Величина  $a$  определяется из условия  $C_1(t=0) = 1$ :

$$a = V_{21} \left( \frac{2i}{\tau} + \omega^{(2)} - \omega^{(1)} \right)^{-1}.$$

Из уравнения (2.81) найдем частоты  $\omega^{(1)}$ ,  $\omega^{(2)}$ :

$$\omega = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} \left( \varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right)^2 + |V_{12}|^2}. \quad (2.82)$$

Рассмотрим случай  $|V_{12}| \ll 1/\tau$ . Тогда из (2.82)

$$\omega^{(1)} \approx \varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau}, \quad \omega^{(2)} \approx \frac{V_{12}^2}{\varepsilon_{12}^2 + \frac{1}{\tau^2}} \frac{i}{\tau}.$$

Следовательно, состояние  $2s_{1/2}$  имеет в этом случае очень большое время жизни  $\sim 1/|V_{12}|^2 \tau$ .

Рассмотрим теперь противоположный предельный случай, когда наложенное поле столь велико, что  $|V_{12}| \gg 1/\tau$ . Тогда

$$\omega^{(1, 2)} \approx \frac{1}{2} \left( \varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right) \pm |V_{12}| \pm \frac{1}{8|V_{12}|} \left( \varepsilon_{12} + \frac{i}{\tau} \right)^2$$

и время затухания  $C_1$  становится равным по порядку величины времени жизни дипольного состояния  $\tau$ .

Итак, время жизни состояния  $2s_{1/2}$  атома водорода чрезвычайно сильно (на девять порядков) уменьшается при наложении электрического поля порядка  $\mathcal{E} \sim \frac{1}{x_{12}\tau} \sim \frac{1}{\tau} \sim \sim c^{-3} \sim \frac{10^9}{c^3} \text{ в} \sim 500 \text{ в}.$

## КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

В этой главе мы рассмотрим в одномерном и трехмерном случаях приближенный метод решения волнового уравнения, когда потенциал медленно изменяется на длине волны частицы. С простейшим случаем такого приближения мы познакомились в 1.1.

## 1. ОДНОМЕРНАЯ ЗАДАЧА

Напишем уравнение Шредингера в виде

$$\varphi'' + k^2(x) \varphi = 0, \quad (3.1)$$

где

$$k^2(x) = 2[E - V(x)].$$

(считаем  $\hbar = M = 1$ ). Пусть потенциал  $V(x)$  достаточно медленно меняется с изменением координаты, так что

$$kl \gg 1, \quad (3.2)$$

где  $l$  — длина, на которой существенно меняется  $V(x)$ .

Тогда можно найти приближенное решение (3.1). Ищем решение (3.1) в виде  $\varphi = Ae^{iS}$ , где  $A$  и  $S$  — действительные функции координаты. Имеем  $\varphi' = e^{iS}(A' + iS'A)$  и  $\varphi'' = e^{iS}(A'' + 2iS'A' + iS''A - S'^2A)$ . Из (3.1) имеем

$$A'' + 2iA'S' + iS''A - S'^2A + k^2A = 0.$$

Отделяя вещественную часть от мнимой, получаем два соотношения:

$$A'' + S'^2A + k^2A = 0, \quad (3.3)$$

$$S''A + 2A'S' = 0. \quad (3.4)$$

Перепишем (3.4) в виде  $\frac{A'}{A} = -\frac{S''}{2S'}$ .

Отсюда

$$A = \frac{a}{\sqrt{S'}},$$

где  $a$  — постоянная величина. Из (3.3) имеем

$$(S')^2 = k^2 + \frac{A''}{A}.$$

Так как  $k$  меняется существенно на длине  $l$ , то и  $S'$ , а следовательно, и  $A$  меняются существенно на той же длине. Поэтому  $A''/A \sim 1/l^2$ , т. е.  $A''/k^2 A \sim 1/(kl)^2 \ll 1$ , и в первом приближении можно считать  $(S')^2 = k^2$ .

Тогда решение задачи имеет вид

$$\varphi(x) = \frac{a}{\sqrt{k(x)}} \exp \left[ \pm i \int_{x_1}^x k dx \right]. \quad (3.5)$$

Это относится к случаю  $E > V$ , когда  $k$  вещественно. В случае  $E < V$  решение будет содержать растущую и затухающую экспоненты, т. е.

$$\varphi(x) = A \exp \left[ \pm \int_{x_1}^x |k| dx \right],$$

где  $A = a/\sqrt{|k|}$ . Мы получили первое приближение в разложении по степеням величины  $1/(kl)^2$ . Ясно, как получать и следующие приближения. Оказывается, что получающийся при этом ряд по степеням параметра  $1/(kl)^2$  асимптотический, а не обычный.

**Задача.** Показать, что при приближенной оценке производной от квазиклассической функции нужно дифференцировать лишь экспоненту.

### Асимптотические ряды

Напомним, что такое асимптотический ряд. Пусть

$$s_n = \sum_{\nu=0}^n \frac{a_\nu}{z^\nu}$$

— частичная сумма ряда. Пусть при фиксированном  $z$  и  $n \rightarrow \infty$  величина  $s_n \rightarrow \infty$ , но при фиксированном  $n$  и  $z \rightarrow \infty$  сумма  $s_n$  все лучше и лучше аппроксимирует некоторую функцию  $f(z)$ , т. е.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z^n [s_n(z) - f(z)] = 0.$$

Тогда говорят, что  $s_n$  есть асимптотическое представление  $f(z)$ . Это не есть ряд в обычном смысле этого слова, так как  $s_n$  расходится. Но из него можно извлечь сведения о функции  $f(z)$ , так как при  $z \rightarrow \infty$  он хорошо представляет эту функцию.

Построим  $s_n(z)$  по заданной  $f(z)$ . Величина  $s_0$  равна  $a_0$ , следовательно,  $a_0 = f(\infty)$ . Величина  $s_1 = a_0 + a_1/z$ , тогда

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z \left( a_0 + \frac{a_1}{z} - f(z) \right) = 0,$$

т. е.

$$a_1 = \lim_{z \rightarrow \infty} z \left[ f(z) - a_0 \right] = \lim_{z \rightarrow \infty} z [f(z) - f(\infty)].$$

Аналогичным образом находятся все коэффициенты  $a_n$ .

Однако восстановить обратно функцию по ее асимптотическому представлению нельзя. Например, пусть  $f(z) = e^{-z}$ , тогда

$$a_0 = 0, \quad a_1 = \lim_{z \rightarrow \infty} z e^{-z} = 0, \quad a_2 = a_3 = \dots = a_n = 0.$$

Следовательно, весь асимптотический ряд равен нулю для функции  $e^{-z}$ . Итак, функции  $f(z)$  и  $f(z) + e^{-z}$  имеют одинаковые асимптотические представления.

Обозначим  $z \equiv (kl)^2$ . Оказывается, что квазиклассическое решение

$$\varphi_{\text{квазикл}}(x) \approx \sum_{\nu=0}^n \frac{a_\nu(x)}{z^\nu} \quad (3.6)$$

есть асимптотический ряд, т. е. расходящийся при  $n \rightarrow \infty$ . Однако при  $z \rightarrow \infty$  величина  $a_0(x)$  сколь угодно хорошо представляет функцию  $\varphi(x)$  (точное решение).

Пусть, далее,  $z$  фиксировано. При  $n \rightarrow \infty$  ряд (3.6) расходится. Следовательно, при любом  $z$  есть оптимальное число членов  $n(z)$ , которое наилучшим образом описывает функцию  $\varphi(x)$ . Мы будем пользоваться только нулевым членом этого ряда. Следующие приближения не обязательно должны улучшить, они могут и ухудшить решение.

Поскольку квазиклассическое приближение есть асимптотический ряд по степеням параметра  $1/(kl)^2$ , в нем теряются эффекты, экспоненциально малые при больших значениях этого параметра.

### Сшивание квазиклассических функций

В этом разделе мы найдем, как нужно сшивать квазиклассическую волновую функцию  $\varphi$  в области, доступной для классического движения, с  $\varphi$  в запрещенной области. Для определенности предположим, что потенциальная энергия частицы имеет вид, изображенный на рис. 24 (начало координат взято в точке, где  $V(x) = E$ ).

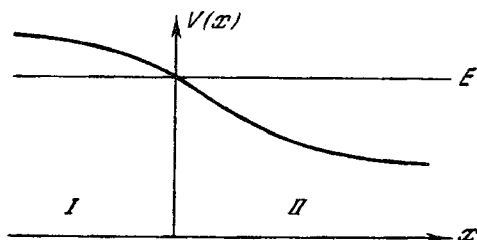


Рис. 24.

Квазиклассическое решение в области  $II$  (классически доступной) согласно (3.5) имеет вид

$$\varphi = \frac{a_1}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_0^x k dx\right) + \frac{a_2}{\sqrt{k}} \exp\left(-i \int_0^x k dx\right), \quad (3.7)$$

а в области  $I$  (классически недоступной)

$$\varphi = \frac{b_1}{\sqrt{|k|}} \exp\left(\int_x^0 |k| dx\right) + \frac{b_2}{\sqrt{|k|}} \exp\left(-\int_x^0 |k| dx\right). \quad (3.8)$$

Если бы квазиклассическое решение было аналитической функцией  $x$  в окрестности  $x=0$ , то для нахождения соотношений между  $a_1$ ,  $a_2$  и  $b_1$ ,  $b_2$  нужно было бы аналитически продолжить это решение из  $II$  в  $I$  (при этом экспоненты в (3.7) просто перешли бы в экспоненты (3.8)).

Правда, по вещественной оси нельзя было бы двигаться, так как в окрестности  $x=0$  квазиклассика неприменима ( $k(0)=0$ , поэтому условие  $kl \gg 1$  не выполняется). Эту трудность можно было бы преодолеть, обойдя точку



$x=0$  в комплексной плоскости по дуге достаточно большого радиуса (где применима квазиклассика).

Однако такое аналитическое продолжение дает, как мы увидим, неправильный результат.

Оказывается, что при таком обходе обязательно пересекаются линии (они называются линиями Стокса), где портится аналитическое продолжение. Поэтому такой способ нужно применять осторожно. Ниже мы покажем, как это сделать.

Другой возможный путь состоит в том, чтобы искать точное решение задачи вблизи  $x=0$ , считая потенциал прямолинейным. Это решение описывается так называемой функцией Эйри. Затем нужно сшить точное решение с квазиклассическим при  $x > 0$  и  $x < 0$ .

Разумеется, так можно поступать только зная, что квазиклассическое приближение становится применимым на расстояниях от точки поворота, малых по сравнению с расстоянием, на котором потенциал существенно отклоняется от прямолинейного. Покажем, что при большом параметре квазиклассичности ( $k^2 l^2 \gg 1$ ) это действительно так.

Разложим для этого потенциал  $V(x)$  вблизи  $x=0$  в ряд:  $V(x) \approx E + V'(0)x$ . Тогда импульс  $k(x) = \sqrt{-2V'(0)x} \equiv \alpha \sqrt{x}$ . Оценим величину  $\alpha$ :  $\alpha \sim \sqrt{|V'(0)|} \sim \sqrt{\frac{V(0)}{l}} \sim \frac{k_0}{\sqrt{l}}$ , где  $k_0 = \sqrt{2E}$ , а  $l$  — длина, на которой существенно меняется потенциал  $V(x)$ . Итак, в окрестности точки  $x=0$  величина  $k(x) \sim k_0 \sqrt{\frac{x}{l}}$ . Чтобы квазиклассическое приближение было применимо, нужно отойти от точки  $x=0$  на такое расстояние, чтобы  $d\left(\frac{1}{k}\right)/dx \ll 1$

или  $\frac{\sqrt{l}}{k_0 \sqrt{x^3}} \ll 1$ . Отсюда находим:  $x \gg l/(k_0 l)^{2/3}$ . Так как  $k_0 l \gg 1$ , то можно выбрать такое  $x_1$ , что

$$\frac{l}{(k_0 l)^{2/3}} \ll x_1 \ll l.$$

На расстояниях  $\sim x_1$ , с одной стороны, уже годится квазиклассическое приближение, а с другой, — потенциал все еще можно считать прямолинейным.

Сшивка с помощью функций Эйри для потенциала, изображенного на рис. 24, имеет вид\*)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left[ i \int_0^x k dx - \frac{\pi}{4} \right] &\rightarrow \frac{1}{i \sqrt{|k|}} \exp \left[ \int_x^0 |k| dx \right] + \\ &+ \frac{1}{2 \sqrt{|k|}} \exp \left[ - \int_x^0 |k| dx \right], \quad (3.9) \\ \frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left[ -i \int_0^x k dx + \frac{\pi}{4} \right] &\rightarrow \frac{-1}{i \sqrt{|k|}} \exp \left[ \int_x^0 |k| dx \right] + \\ &+ \frac{1}{2 \sqrt{|k|}} \exp \left[ - \int_x^0 |k| dx \right]. \end{aligned}$$

Сейчас мы получим эти соотношения, не прибегая к функциям Эйри. Выберем радиус обхода  $\rho$  порядка  $x_1$  (рис. 25). Тогда можно пользоваться квазиклассическим приближением и в то же время считать потенциал прямолинейным. Так как при этом  $k(x) =$

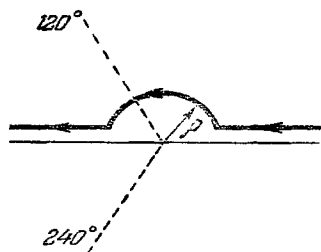


Рис. 25.

$= \alpha x^{1/2}$ , то  $\int_0^x k dx = \frac{2}{3} \alpha x^{3/2}$ . В комплексной плоскости  $x = \rho e^{i\varphi}$  и  $\int_0^x k dx = \frac{2}{3} \alpha \rho^{3/2} \exp \left( \frac{3}{2} i\varphi \right)$ . Поэтому

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left[ i \int_0^x k dx \right] &= \frac{1}{\sqrt{\alpha \rho^{1/2}}} e^{-i \frac{\varphi}{4}} \exp \left[ \frac{2}{3} \alpha \rho^{3/2} \left( i \cos \frac{3}{2} \varphi - \right. \right. \\ &\left. \left. - \sin \frac{3}{2} \varphi \right) \right]. \quad (3.10) \end{aligned}$$

По мере обхода контура до тех пор, пока  $\varphi < \frac{2\pi}{3}$ ,  $\sin \frac{3}{2} \varphi$  положителен, а выражение (3.10) содержит зату-

\*) Шифф Л., Квантовая механика, ИЛ, 1959.

хающую экспоненту. Если  $\varphi > \frac{2\pi}{3}$ , то (3.10) содержит растущую экспоненту. Как только появляется растущая экспонента, все слагаемые, содержащие убывающую экспоненту, не должны учитываться, поскольку квазиклассическое приближение, будучи асимптотическим представлением, имеет по параметру квазиклассичности степенную ( $\sim \frac{1}{k^2 l^2}$ ), а не экспоненциальную точность.

При движении по окружности радиуса  $\rho$  в верхней полуплоскости выражение  $e^{i \frac{2}{3} \alpha x^{3/2}}$  переходит сначала в убывающую экспоненту, а затем после пересечения линии  $\varphi = \frac{2\pi}{3}$  — в растущую экспоненту; как только появилась растущая экспонента, из-за неточности квазиклассического приближения возникает экспоненциально малая ошибка. Поэтому аналитическое продолжение позволяет найти коэффициент только при растущей экспоненте.

Получаем

$$\frac{1}{\sqrt{k}} \exp \left[ i \int_0^x k dx - \frac{\pi}{4} \right] \rightarrow \frac{1}{i \sqrt{|k|}} \exp \left[ \int_x^0 |k| dx \right]. \quad (3.11)$$

При этом мы потеряли слагаемое, экспоненциально малое по сравнению с правой частью (3.11).

При обходе точки  $x=0$  снизу функция (3.11) переходит сначала в растущую экспоненту, а затем после пересечения линии

$$\varphi = -\frac{2\pi}{3}$$

— в убывающую. Потерянная из-за неточности квазиклассического приближения в области  $-\frac{2\pi}{3} < \varphi < 0$  экспоненциально малая добавка после перехода в область  $-\pi < \varphi < -\frac{2\pi}{3}$  превращается в экспоненциально большой член, который таким образом теряется. Следовательно, таким путем мы не можем получить правильное значение коэффициента при убывающей экспоненте.

Как его получить? Предположим, что в классически недоступной области (при  $V > E$ ) есть только затухающая экспонента:

$$\frac{1}{\sqrt{|k|}} \exp \left[ -\int_x^0 |k| dx \right]. \quad (3.12)$$

Общее решение при  $V < E$  имеет вид

$$\frac{C_1}{\sqrt{k}} \exp \left[ i \int_0^x k dx - i\varphi_1 \right] + \frac{C_2}{\sqrt{k}} \exp \left[ -i \int_0^x k dx + i\varphi_2 \right]. \quad (3.13)$$

Найдем  $C_1$ ,  $C_2$  и  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ . Для этого продолжим аналитически (3.12) в область  $x > 0$ . Аналитическое продолжение через верхнюю полуплоскость имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{|k|}} \exp \left[ -\int_x^0 |k| dx \right] &\rightarrow \\ &\rightarrow \frac{\exp [i\pi/4]}{\sqrt{\alpha\rho^{1/2} \exp (i\varphi/2)}} \exp \left[ \frac{2}{3} \alpha\rho^{1/2} \left( \sin \frac{3}{2} \varphi - i \cos \frac{3}{2} \varphi \right) \right]. \end{aligned}$$

При  $\varphi = 0$  получаем второе слагаемое (3.13), причем  $\varphi_2 = -\pi/4$ ,  $C_2 = 1$ . Аналитически продолжая через нижнюю полуплоскость, мы получили бы первое слагаемое (3.13) со значениями

$$\begin{aligned} \varphi_1 = \varphi_2 &= -\pi/4, \\ C_1 = C_2 &= 1. \end{aligned}$$

Каждый раз второе слагаемое теряется из-за экспоненциально малой ошибки в той области, где функция экспоненциально велика. Таким образом, имеем

$$\frac{1}{\sqrt{|k|}} \exp \left[ -\int_x^0 |k| dx \right] \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_0^x k dx - \frac{\pi}{4} \right)$$

в согласии с (3.9).

## Условие квантования

Квазиклассическое решение уравнения Шредингера в классически доступной области ( $x_1 < x < x_2$ ; рис. 26) можно записать двумя способами: один раз — сшивая осциллирующее решение с затухающим в точке  $x_1$ , а другой раз — в точке  $x_2$ . Требование совпадения этих двух функций и даст нам условие квантования.

Первое из решений имеет вид

$$\varphi_1 = \frac{a_1}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_{x_1}^x k dx - C_1 \pi \right),$$

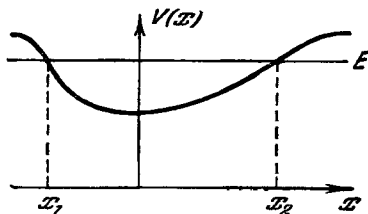


Рис. 26.

где  $C_1 \pi$  — фаза, которая возникает при сшивке с затухающей экспонентой для  $x < x_1$ . В тех случаях, когда потенциал в окрестности точки  $x_1$  имеет линейный ход, получается, как мы видели,  $C_1 = 1/4$ .

Второе из решений имеет вид

$$\varphi_2 = \frac{a_2}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_x^{x_2} k dx - C_2 \pi \right).$$

Условие совпадения решений даст

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = (n + C_1 + C_2) \pi \quad (3.14)$$

(при этом  $a_1 = a_2 (-1)^n$ ).

Нетрудно видеть, что  $\cos \left( \int_{x_1}^x k dx - C_1 \pi \right)$  проходит через нуль  $n$  раз, т. е.  $n$  — число узлов волновой функции в интервале  $[x_1, x_2]$ .

Проверим правило квантования (3.14) (так называемое правило квантования Бора) на примере одномерной прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками. Так как

волновая функция должна обращаться в нуль как на левой, так и на правой границах, то  $C_1 = C_2 = 1/2$ . Получаем

$$\int_{x_1}^{x_2} k_n dx = k_n L = (n + 1) \pi, \quad E_n = \frac{1}{2} k_n^2 = \frac{\pi^2}{2L^2} (n + 1)^2,$$

где  $L$  — длина ямы. Наинизшему состоянию соответствует число узлов  $n = 0$ .

В наиболее частом случае, когда потенциал имеет линейный ход как вблизи  $x_1$ , так и вблизи  $x_2$ , получаем правило квантования

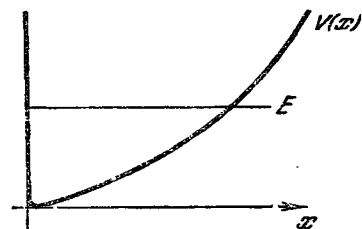


Рис. 27.

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi.$$

Мы увидим ниже (стр. 137), что применение квазиклассического приближения для радиальной кулоновской функции при  $l = 0$  дает  $C_1 = 3/4$ ,  $C_2 = 1/4$ , а при  $l \neq 0$   $C_1 = C_2 = 1/4$ .

**Задача.** Показать, что для потенциала, изображенного на рис. 27, условие квантования имеет вид

$$\int_{x_1}^{x_2} k dx = \left( n + \frac{3}{4} \right) \pi.$$

### Точность квазиклассического приближения

Единственное приближение, которое мы делали при выводе наших формул, состояло в отбрасывании слагаемого

$$\frac{A''}{k^2 A} \sim \frac{A/l^2}{k^2 A} \sim \frac{1}{(kl)^2}.$$

Для оценки  $kl$  заметим, что

$$\int k dr \sim kl \sim n\pi,$$

где  $n$  — число узлов. Следовательно, квазиклассическое приближение справедливо с точностью до  $1/\pi^2 n^2$  (а не  $1/n$ ).

Именно поэтому в правиле квантования Бора законно сохранять добавку  $1/2$  к числу узлов  $n$ , которая представляет собой поправку  $\sim 1/n$ .

### Нормировка квазиклассических функций

Существенный вклад в нормировочный интеграл внесет лишь область  $x_1 < x < x_2$  (см. рис. 26), так как вне ее волновая функция экспоненциально затухает. При  $x_1 < x < x_2$  волновая функция

$$\varphi_n = \frac{a}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

следовательно,

$$\int |\varphi_n|^2 dx = 1 \approx \int_{x_1}^{x_2} \frac{a^2}{k} \cos^2 \Phi dx,$$

где

$$\Phi = \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4}.$$

При  $E = E_n$  волновая функция  $\varphi_n$  имеет  $n$  узлов в области  $[x_1, x_2]$ , так как  $\int_{x_1}^{x_2} k dx$  изменяется от нуля до  $(n + 1/2)\pi$  и  $\cos \Phi$  будет  $n$  раз обращаться в нуль. Если  $n$  велико, то фаза  $\Phi$  — большое число. Далее,  $\cos^2 \Phi = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos 2\Phi$ . Второе слагаемое много раз изменяет знак и поэтому внесет малый вклад. Следовательно,

$$1 \approx \frac{a^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{k} = \frac{a^2}{2} T,$$

где  $T$  — период классического движения. Итак,

$$a^2 = \frac{4}{T} = \frac{2}{\pi} \omega,$$

где  $\omega$  — частота колебаний в соответствующей классической задаче. Таким образом,

$$\varphi_n = \sqrt{\frac{2\omega}{\pi k}} \cos \left( \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right). \quad (3.15)$$

**Задача.** Оценить вклад в нормировочный множитель от классически недоступной области.

**Ответ.**

$$1/(\pi n)^{1/2}.$$

### Принцип соответствия

Из правила квантования (3.9) дифференцированием по  $n$  получаем

$$\pi = \frac{d\varepsilon_n}{dn} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{k} = \frac{d\varepsilon_n}{dn} \frac{\pi}{\omega},$$

откуда

$$\frac{d\varepsilon_n}{dn} = \omega. \quad (3.16)$$

Это соотношение называется принципом соответствия: при больших квантовых числах разность соседних уровней энергии равна классической частоте движения.

### Средняя кинетическая энергия

Выразим среднюю кинетическую энергию частицы при квазиклассическом движении через ее полную энергию:

$$\bar{T} = \frac{1}{2} \int \varphi_n^* \hat{p}^2 \varphi_n dx = -\frac{1}{2} \int \varphi_n^* \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n dx \approx \frac{1}{2} \int \varphi_n^* k^2 \varphi_n dx.$$

Здесь величина  $k$  — число, а не оператор. Дифференцирование  $1/\sqrt{k}$  в  $\varphi_n = \frac{a}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right)$  вносит малый вклад



в  $\bar{T}$ . Используя (3.16), получим

$$\begin{aligned} \bar{T} &= \frac{a^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} k^2 \frac{1}{k} \cos^2 \Phi dx = \frac{a^2}{4} \int_{x_1}^{x_2} k dx = \\ &= \frac{a^2}{4} \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi = \frac{1}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{d\varepsilon_n}{dn}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

В случае кулоновского потенциала при  $l=0$  условие квантования не содержит  $1/2$  и

$$\bar{T} = \frac{1}{2} n \frac{d\varepsilon_n}{dn}. \quad (3.18)$$

Если принять во внимание теорему вириала

$$\bar{T} = \frac{1}{2} x \frac{dV}{dx}, \quad (3.19)$$

то из (3.17) и (3.19) можно найти собственные значения энергии в квазиклассическом случае. Например, для осциллятора  $V \sim x^2$  и  $x \frac{dV}{dx} = 2\bar{T}$ , т. е.  $\bar{T} = \bar{V}$ . Следовательно,

$$\left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{d\varepsilon_n}{dn} = \varepsilon_n.$$

Решая это уравнение, получим  $\varepsilon_n = C(n + 1/2)$ . Из принципа соответствия следует, что  $C = \omega$  — частоте классического движения, следовательно,  $\varepsilon_n = (n + 1/2)\omega$ . Далее, для кулоновского потенциала при  $l=0$  из (3.18) и (3.19):  $\bar{T} = -1/2 \bar{V} = -\frac{1}{2} n \frac{d\varepsilon_n}{dn}$ ,  $\varepsilon_n = \bar{T} - 2\bar{T} = -\bar{T} = -\frac{1}{2} n \frac{d\varepsilon_n}{dn}$ . Ре-

шение этого уравнения есть  $\varepsilon_n = C/n^2$ . Мы видели (стр. 36), что из принципа соответствия следует  $C = -1/2$ .

### Связь квазиклассических матричных элементов с компонентами Фурье классического движения

Свяжем матричный элемент  $\int \varphi_n^* U(x) \varphi_n dx$  одномерной задачи с компонентой Фурье от классической величины  $U[x(t)]$  (например, дипольный матричный элемент

$$\int \varphi_n^* x \varphi_n dx$$

можно связать с компонентой Фурье классической координаты движения  $x(t)$ .

Пусть  $n$  и  $n'$  не очень сильно отличаются друг от друга, именно,

$$\frac{|n' - n|}{n} \ll 1, \quad n \gg 1, \quad n' \gg 1.$$

Тогда матричный элемент

$$\begin{aligned} U_{nn'} &= \int \varphi_n^* U \varphi_{n'} dx = a_n a_{n'} \int \frac{U}{\sqrt{kk'}} \cos \Phi_n \cos \Phi_{n'} dx = \\ &= a_n^2 \int U [\cos (\Phi_n - \Phi_{n'}) + \cos (\Phi_n + \Phi_{n'})] \frac{dx}{2k}. \end{aligned}$$

Так как  $\Phi_n$  и  $\Phi_{n'}$  велики, то второе слагаемое в подынтегральном выражении можно отбросить из-за сильной осцилляции  $\cos (\Phi_n + \Phi_{n'})$ . Следовательно,

$$U_{nn'} = \frac{a_n^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} U(x) \cos (\Phi_n - \Phi_{n'}) \frac{dx}{v}.$$

Так как

$$\begin{aligned} \Phi_n - \Phi_{n'} &= \int_{x_n}^x k_n dx - \int_{x_{n'}}^x k_{n'} dx \approx \int_{x_n}^x \frac{dx}{k_n} (\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}) = \\ &= \frac{d\varepsilon_n}{dn} (n - n') \int_{x_1}^x \frac{dx}{v} = \frac{d\varepsilon_n}{dn} (n - n') t, \end{aligned}$$

то

$$U_{nn'} = \frac{2}{T} \int_0^{T/2} U[x(t)] \cos \frac{2\pi(n-n')t}{T} dt.$$

Итак, матричный элемент величины  $U(x)$  в квазиклассическом приближении равен фурье-компоненте величины  $U[x(t)]$ .

### Критерий применимости теории возмущений для расчета не слишком малых величин

При возмущении  $n$ -го состояния дискретного спектра критерий применимости теории возмущений имеет вид  $H' \ll E_{nm}$ , где  $H'$  — матричный элемент возмущения, а  $E_{nm} = E_n - E_m$ .

Здесь  $E_n$  и  $E_m$  означают ближайшие уровни, для которых матричный элемент  $H'_{nm}$  не мал. Так как

$$E_{nm} \sim \frac{dE_n}{dn} \sim \frac{E_n}{n},$$

где  $n$  — число узлов волновой функции, то это условие сводится к

$$\frac{H'}{E_n} n \ll 1. \quad (3.20)$$

В квазиклассическом случае  $n \gg 1$ , и это условие может не выполняться. Покажем, что для вычисления не слишком малых величин его можно заменить более мягким условием:

$$\frac{H'}{E_n} \ll 1. \quad (3.21)$$

Для доказательства этого утверждения рассмотрим матричный элемент  $U_{nm} = (\Phi_n | U | \Phi_m)$ . Пусть  $U(x)$  — плавная функция. Тогда  $U_{nm} \neq 0$ , лишь когда  $n$  и  $m$  мало отличаются друг от друга (иначе у подынтегральной функции будет много узлов). Воспользовавшись квазиклассическими волновыми функциями, получаем

$$U_{nm} \approx \frac{a_n a_m}{2} \int U(x) \frac{dx}{\sqrt{k_n k_m}} \{ \cos(\Phi_n - \Phi_m) + \cos(\Phi_n + \Phi_m) \}.$$

Второе слагаемое в подынтегральном выражении для  $U_{nm}$  осциллирует  $n + m$  раз, поэтому его вкладом можно пренебречь. Следовательно,

$$U_{nm} \approx \frac{a_n a_m}{2} \int U(x) \frac{\cos(\Phi_n - \Phi_m)}{\sqrt{k_n k_m}} dx. \quad (3.22)$$

Пусть теперь к потенциалу  $V(x)$  добавляется малая величина  $H'(x)$ . Так как  $k_n = \sqrt{2[E_n - V(x)]}$ , то

$$\Delta k_n = \sqrt{2[E_n - V(x) - H'(x)]} - \sqrt{2[E_n - V(x)]} \sim \frac{H'}{k_n},$$

следовательно,  $\Delta k_n / k_n \sim H' / k_n^2 \sim H' / E_n$ , если  $V$  не близко к  $E_n$  (иначе квазиклассика неприменима). Следовательно, условие  $\Delta k_n / k_n \ll 1$  эквивалентно  $H' / E_n \ll 1$ , т. е. изменением  $k$  можно пренебречь при выполнении условия (3.21).

При вычислении фазы  $\Phi_n = \int_{x_1}^x k_n dx - \frac{\pi}{4}$  этого нельзя делать, так как  $\delta\Phi_n \approx \int_{x_1}^x \delta k_n dx \approx \int \frac{H'}{E_n} k_n dx \sim \frac{H'}{E_n} n$ , где  $n$ -число узлов. Поэтому условие  $\delta\Phi_n \ll 1$  означает  $\frac{H'}{E_n} n \ll 1$ ; отсюда и возник критерий теории возмущений.

Однако мы видим, что для вычисления величин, содержащих  $\Phi_n - \Phi_m$ , причем  $|n - m| \sim 1$ , изменение разности фаз имеет порядок

$$\delta(\Phi_n - \Phi_m) \sim \frac{H'}{E_n} (n - m) \sim \frac{H'}{E_n}.$$

Следовательно, изменение больших матричных элементов  $U_{nm}$  при возмущении потенциала на величину  $H'(x)$  определяется условием  $H'/E_n \ll 1$ , что и нужно было показать.

Если  $|n - m|$  не мало, то изучаемый матричный элемент мал из-за осцилляций  $\cos(\Phi_n - \Phi_m)$ .

Выясним, как изменяется квазиклассическая волновая функция  $\Psi = Ae^{iS}$  при добавлении малой величины  $H'(x)$  к потенциалу  $V(x)$ . Изменение  $A$  определяется величиной  $H'/E$ , поскольку  $A \sim 1/\sqrt{k}$ , а  $\Delta k/k \sim H'/E$ , как уже было найдено. Но  $S = \int k dl$ , поэтому  $\delta S \sim n \frac{H'}{E}$ , так что  $\delta S$  может быть и больше 1, хотя  $H'/E \ll 1$ . Изменение  $\Psi$  при добавлении  $H'$  равно:

$$\delta\Psi \approx \Psi e^{i\delta S} \approx \Psi \exp\left(-\int \frac{H'dx}{k}\right).$$

Возмущение, вызываемое деформацией ядра, не удовлетворяет критерию (3.20), но критерий (3.21) выполняется. Поэтому для вычисления не очень малых величин можно пользоваться теорией возмущений (стр. 74).

### Надбарьерное отражение

Решим задачу об отражении частицы при движении с энергией, большей высоты барьера, так что везде выполняется критерий квазиклассического приближения. Легко увидеть, что ни в каком приближении по параметру квази-

классичности  $1/(kl)^2$  не возникает отраженной волны. Действительно, квазиклассическое приближение, соответствующее идущей направо волне, имеет вид

$$A \exp \left[ i \int_{x_1}^x \sqrt{k^2 + A''/A} dx \right].$$

Разлагая это решение по степеням  $A''/A$ , получим всюду только волны, идущие вправо.

Причина этого результата в том, что коэффициент отражения экспоненциально падает с увеличением  $(kl)^2$ , между тем как квазиклассическое решение есть асимптотический ряд и экспоненциально малые добавки в нем полностью теряются.

Целесообразно искать решение уравнения Шредингера

$$\Psi'' + k^2(x) \Psi = 0 \quad (3.23)$$

в виде

$$\Psi = \sqrt{\frac{k_0}{k}} \exp \left( i \int_{-\infty}^x k dx \right) + \varphi,$$

где  $\varphi$  — малая добавка, содержащая отраженную волну.

Тогда получаем

$$\varphi'' + k^2 \varphi = f(x),$$

где

$$f(x) = -A'' \exp \left[ i \int_{-\infty}^x k dx \right].$$

Выразим решение этого неоднородного уравнения через два решения соответствующего однородного уравнения  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  ( $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  — волны, идущие соответственно вправо и влево):

$$\varphi = \frac{1}{\Delta} \left\{ \Psi_1 \int \Psi_2 f dx - \Psi_2 \int \Psi_1 f dx \right\},$$

где

$$\Delta = \Psi_1' \Psi_2 - \Psi_1 \Psi_2' = \text{const}$$

— определитель Вронского.

Итак, решение уравнения Шредингера (3.23) имеет вид

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{k_0}{k}} \exp \left[ i \int_{-\infty}^x k dx \right] + \\ + \frac{1}{\Delta} \left\{ \Psi_1 \int_{-\infty}^x \Psi_2 f dx - \Psi_2 \int_{-\infty}^x \Psi_1 f dx \right\}.$$

Пределы интегрирования определяются из следующих соображений: при  $x \rightarrow \infty$  должна оставаться только волна, идущая вправо; это обеспечивается функцией  $\Psi_1$ . При  $x \rightarrow -\infty$  функция  $\Psi(-\infty)$  должна содержать только отраженную волну. Действительно, при указанном выборе нижнего предела

$$\Psi(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{=} e^{ik_0 x + i\alpha} + \frac{1}{\Delta} e^{-ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 f dx.$$

Так как  $\Delta = \text{const}$ , можно вычислить  $\Delta$  при  $x \rightarrow \infty$ . Функция  $\Psi_1 \rightarrow e^{ik_0 x}$ , а функция  $\Psi_2$  в силу малого коэффициента отражения приближенно стремится к  $e^{-ik_0 x + i\alpha}$ . Отсюда  $|\Delta| = 2k_0$ .

Таким образом, коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{1}{\Delta} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 f dx \right|^2 = \left| \frac{1}{2k_0} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1 f dx \right|^2. \quad (3.24)$$

Заметим, что в (3.24) не используется квазиклассическое приближение.

Если  $V \ll E$ , то из (3.24) получается обычная формула теории возмущений. Действительно, величина  $A' = -\frac{\sqrt{k_0}}{2\sqrt{k^3}} k'$ . Так как  $k = \sqrt{2(E-V)}$ , то  $k' = -V'/k$ , следовательно,  $f = -A'' e^{iS} \approx \frac{V''}{2k_0^2} e^{ik_0 x + i\alpha}$  и

$$R = \left| \frac{1}{4k_0^3} \int_{-\infty}^{\infty} V'' e^{2ik_0 x} dx \right|^2.$$

Интегрируя дважды по частям, получим выражение для коэффициента отражения, совпадающее с тем, что получается по теории возмущений:

$$R = \left| \frac{1}{k_0} \int_{-\infty}^{\infty} V e^{2ik_0 x} dx \right|^2.$$

Величина  $R$  определяется поведением  $\Psi_1 f$  в окрестности ближайшей к вещественной оси особой точки.

## 2. ТРЕХМЕРНАЯ ЗАДАЧА

### Центрально-симметричное поле

Рассмотрим квазиклассическое движение в центрально-симметричном поле. Переменные  $\theta$ ,  $\varphi$  в этом случае отделяются от переменной  $r$ :

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

Рассмотрим сначала радиальную часть волновой функции. Введем функцию

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r).$$

Из ограниченности  $R_{nl}(r)$  при  $r=0$  следует, что  $u_{nl}(0) = 0$ . Для  $u_{nl}$ , как известно, получается одномерное уравнение

$$u_{nl}'' + k_{nl}^2 u_{nl} = 0,$$

где

$$k_{nl}^2 = 2 \left[ \varepsilon_{nl} - V(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right].$$

Условие  $u_{nl}(0) = 0$  соответствует в одномерной задаче бесконечной потенциальной стенке в начале координат.

При увеличении  $l$  и заданном  $V(r)$  яма на рис. 28 становится все мельче и в конце концов исчезает, т. е. при достаточно большом  $l$  система не будет обладать дискретными уровнями. Значениям  $\varepsilon_{nl} > 0$  соответствует сплошной спектр.

## Уровни энергии в кулоновском поле

Найдем уровни энергии в кулоновском поле. Условие квантования имеет вид (при  $l \neq 0$ , рис. 28, б)

$$\int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \sqrt{2 \left( E_n + \frac{Z}{r} - \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2} \right)} dr = \left( n_r + \frac{1}{2} \right) \pi.$$

Здесь  $n_r$  — радиальное квантовое число,  $r_{\min}$ ,  $r_{\max}$  — квазиклассические точки поворота. Мы заменили в центробежном

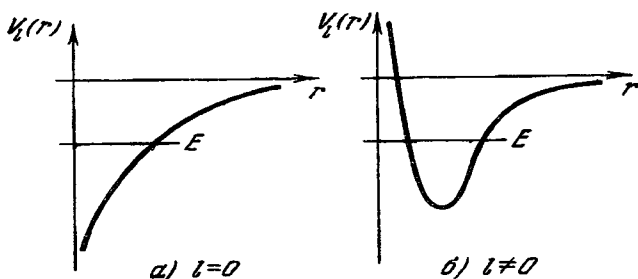


Рис. 28.

потенциале  $l(l+1) \rightarrow (l + 1/2)^2$ . Тогда квазиклассическая функция имеет фазу на бесконечности, совпадающую с точным решением, между тем как другие величины от такой замены практически не меняются. Интеграл в левой части приведенного выше условия равен

$$\frac{Z\pi}{\sqrt{-2E_n}} - \left( l + \frac{1}{2} \right) \pi.$$

Следовательно,

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2},$$

где  $n = n_r + l + 1$  — главное квантовое число.

При  $l = 0$  (рис. 28, а) левая точка поворота  $r_{\min} = 0$  и совпадает с особой точкой уравнения, т. е. в области левой точки поворота потенциал нельзя заменить прямой линией, как мы делали выше. Поэтому условие сшивки на левом краю изменится.



Для нахождения энергетических уровней при  $l=0$  нужно найти точное решение вблизи особой точки и сшить его с квазиклассическим решением вдали от нее.

Для больших квантовых чисел (т. е. энергий, близких к нулю), волновая функция в кулоновском поле с  $l=0$  имеет вид \*)

$$R_{n0} = a_1 Z^{3/2} \frac{J_1(\sqrt{8Zr})}{\sqrt{Zr}},$$

где  $a_1$  — нормировочный коэффициент. При  $r \gg 1/Z$  отсюда находим

$$R_{n0} = a_1 \frac{\cos(\sqrt{8Zr} - 3/4\pi)}{r^{3/4}}.$$

С другой стороны, для  $R_{n0}$  можно написать квазиклассическое решение

$$R_{n0} = a_2 \frac{\cos\left(\int_0^r p_r dr - C_1\pi\right)}{r \sqrt{p_r}} = a_2 \frac{\cos(\sqrt{8Zr} - C_1\pi)}{r \sqrt{p_r}}.$$

Таким образом, здесь появляется фаза  $C_1\pi = \frac{3}{4}\pi$  вместо  $\frac{1}{4}\pi$  в обычном случае.

Функция  $R_{n0}$  может быть также записана в виде

$$R_{n0} = a_3 \frac{\cos\left(\int_r^{r_{\max}} p_r dr - \pi/4\right)}{r \sqrt{p_r}}.$$

Здесь  $r_{\max}$  — правая точка поворота. Из условия однозначности, так же как и в 3.1, получаем правило квантования

$$\int_0^{r_{\max}} p_r dr = (n_r + 1)\pi = n\pi,$$

где  $n$  — главное квантовое число.

---

\*) Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, Физматгиз, 1963.

Вычисление интеграла дает

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}.$$

Как мы видим, в этом случае квазиклассическое приближение (так же как и в случае осциллятора) дает точные уровни энергий.

### Квазиклассическое представление сферических функций

Для вычисления матричных элементов физических величин при больших угловых моментах  $l$  удобно использовать квазиклассическое представление для сферической функции:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Здесь  $P_{lm}(x)$  — присоединенный полином Лежандра, удовлетворяющий уравнению

$$\frac{d}{dx} \left[ (1-x^2) \frac{dP_{lm}}{dx} \right] + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_{lm} = 0.$$

Введем функцию  $\vartheta_{lm}(x)$ :

$$P_{lm}(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \vartheta_{lm}(x).$$

Тогда для  $\vartheta_{lm}(x)$  имеем

$$(1-x^2) \vartheta_{lm}''(x) + \left[ l(l+1) - \frac{m^2+1}{1-x^2} \right] \vartheta_{lm}(x) = 0.$$

Решение этого уравнения с точностью порядка  $1/l^2$  может быть найдено в квазиклассическом виде

$$\vartheta_{lm}(x) = \frac{a}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

где

$$k^2(x) = \frac{1}{1-x^2} \left[ \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{m^2}{1-x^2} \right].$$

В точках  $x_{1,2}$  величина  $k(x)$  обращается в нуль, т.е.

$$x_{1,2} = \mp \sqrt{1 - \frac{m^2}{(l+1/2)^2}}.$$

Мы заменили здесь  $l(l+1) \rightarrow (l + \frac{1}{2})^2$ , имея в виду, что квазиклассическое приближение применимо с точностью до  $1/l^2$  (а не  $1/l$ ; см. 3.1).

Коэффициент  $a$  определяется из условия нормировки присоединенных полиномов Лежандра:

$$\int_{-1}^1 P_{lm}^2(x) dx = 1,$$

т.е.

$$\frac{a^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{1-x^2} \frac{dx}{k} = 1 = \frac{a^2}{2} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial l} \int_{x_1}^{x_2} k dx.$$

Вычислим  $\int_{x_1}^{x_2} k dx$ :

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\frac{1}{(1-x^2)} \left[ \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{m^2}{1-x^2} \right]} dx = \left( l - |m| + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (3.25)$$

Этот результат следовало ожидать, так как число узлов  $P_{lm}(x)$ , как известно, равно  $l - |m|$ .

Из (3.25) находим

$$\frac{\partial}{\partial l} \int_{x_1}^{x_2} k dx = \pi.$$

Следовательно,

$$a^2 = \frac{2l+1}{\pi}.$$

Окончательно имеем

$$P_{lm}(x) = \sqrt{\frac{2l+1}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1}{\sqrt{k}} \cos \left( \int_{x_1}^x k dx - \frac{\pi}{4} \right),$$

где

$$k = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{m^2}{1-x^2}}.$$

Квазиклассическое представление сферических функций позволяет приближенно вычислять суммы вида

$$I_l(\theta) = \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \Phi(m).$$

Действительно, используя условие квантования (3.25) и заменяя суммирование интегрированием, получаем

$$\begin{aligned} I_l(\theta) &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-(l+1/2)|\sin\theta|}^{(l+1/2)|\sin\theta|} \frac{\Phi(m) dm}{(l+1/2)\sin\theta \sqrt{1 - \frac{m^2}{(l+1/2)^2 \sin^2\theta}}} = \\ &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} \Phi[t(l+1/2)\sin\theta]. \end{aligned}$$

В частности, для  $\Phi(m) = 1, m^2, m^4$  находим

$$\begin{aligned} \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} = \frac{2l+1}{4\pi}, \\ \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 m^2 &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} t^2 (l+1/2)^2 \sin^2\theta = \\ &= \frac{(l+1/2)^3}{4\pi} \sin^2\theta, \\ \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 m^4 &= \frac{l+1/2}{2\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{\sqrt{1-t^2}} t^4 (l+1/2)^4 \sin^4\theta = \\ &= \frac{3(l+1/2)^5}{16\pi} \sin^4\theta. \end{aligned}$$

### Распределение Томаса—Ферми в атоме

Для потенциала  $V$  атома можно написать следующее электростатическое уравнение:

$$\Delta V = -4\pi\rho, \quad (3.26)$$

где  $\rho$  — плотность заряда электронов в данной точке. Это

уравнение приближенное, так как на самом деле мы имеем многочастичную задачу — ядро и  $Z$  электронов — и потенциал

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i) = -\frac{Z}{r} + \sum_{i=1}^Z \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}$$

есть оператор, а не число, т. е.  $V$  зависит от электронных координат, в то время как  $\rho$ , очевидно, нет. Следовательно, потенциал, используемый в (3.26), есть значение истинного потенциала, усредненное по движению электронов.

Поскольку частиц много, то отклонения  $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$  от  $V(\mathbf{r})$  будут в среднем малы (хотя формально  $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$  может принимать любые значения). Уравнение Шредингера с таким усредненным потенциалом имеет вид

$$\Delta \Psi + 2(E - V)\Psi = 0,$$

причем потенциал  $V$  можно считать сферически-симметричным (сферическая симметрия может нарушаться лишь за счет наружных электронов или незаполненных оболочек). Тогда

$\Psi_{nlm} = \frac{u_{nl}(r)}{r} Y_{lm}$ , причем для  $u_{nl}(r)$  имеем уравнение

$$u_{nl}'' + k_{nl}^2 u_{nl} = 0, \quad (3.27)$$

где

$$k_{nl}^2 = 2 \left[ E - V(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right].$$

Функция  $u_{nl}$  удовлетворяет граничным условиям

$$u_{nl}(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} u_{nl}(r) = 0$$

и нормирована следующим образом:

$$\int_0^{\infty} u_{nl}^2 dr = 1.$$

(функцию  $u_{nl}$  можно считать вещественной).

Плотность заряда электронов равна (как и всюду,  $e = \hbar = m = 1$ ):

$$\rho = -2 \sum_{nlm} |\Psi_{nlm}|^2 = -2 \sum_{nlm} \frac{u_{nl}^2}{r^2} |Y_{lm}|^2. \quad (3.28)$$

Суммирование по  $m$  с учетом соотношения (стр. 140)

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}$$

приводит к выражению

$$\rho(r) = -2 \sum \frac{u_{nl}^2(r)}{r^2} \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (3.29)$$

В квазиклассическом приближении радиальная волновая функция имеет вид

$$u_{nl}(r) = \frac{a_{nl}}{\sqrt{k_{nl}}} \cos\left(\int_{r_1}^r k_{nl} dr - \frac{\pi}{4}\right), \quad (3.30)$$

где

$$k_{nl}^2(r) = E_{nl} - V(r) - \frac{(l+1/2)^2}{2r^2}, \quad a_{nl}^2 \approx \frac{2}{\pi} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n}.$$

Уровни энергии  $E_{nl}$  находятся из правила квантования Бора

$$\int_{r_1}^{r_2} k_{nl} dr = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi. \quad (3.31)$$

При  $l=0$  вместо  $n+1/2$  в соотношении (3.31) нужно написать  $n$  (см. стр. 137).

Из (3.29) и (3.30) получаем

$$\rho(r) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{nl} \frac{a_{nl}^2}{k_{nl} r^2} (2l+1) \cos^2\left(\int_{r_1}^r k_{nl} dr - \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.32)$$

В квазиклассическом приближении можно заменить среднее значение квадрата косинуса на  $1/2$ .

Из (3.32) имеем

$$\rho(r) = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_{nl} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{2l+1}{r^2} \frac{1}{k_{nl}}. \quad (3.33)$$

От суммирования по  $n$  в (3.33) перейдем к интегрированию

при фиксированном  $l$ ; так как

$$\sum_n \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} (\dots) \rightarrow \int \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} dn (\dots) \rightarrow \int dE (\dots),$$

то

$$\sum_n \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{1}{k_{nl}} = \int \frac{dE}{k_{nl}} = \int \frac{dE}{\sqrt{2(E-V_l)}} = \sqrt{2(E-V_l)} \Big|_{E_{\min}}^0,$$

где  $E_{\min} = V_l$  (при  $E > V_l$  волновая функция имеет вид  $\cos\left(\int k dr - \frac{\pi}{4}\right)$ , а при  $E < V_l$  она затухает экспоненциально и вкладом этой части в  $\rho(r)$  можно пренебречь). Поэтому выражение (3.33) можно записать в виде

$$\rho(r) = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_l \frac{2l+1}{r^2} \sqrt{-2V_l}. \quad (3.34)$$

Так как  $V_l = V + \frac{1}{2r^2} \left(l + \frac{1}{2}\right)^2$ , то  $\frac{dV_l}{dl} = \frac{2l+1}{r^2}$ , так что (3.34) принимает вид

$$\begin{aligned} \rho(r) &= -\frac{1}{\pi^2} \sum_l \frac{dV_l}{dl} \sqrt{-2V_l} = -\frac{1}{\pi^2} \int \sqrt{-2V_l} dV_l = \\ &= -\frac{2}{3 \cdot 2\pi^2} (-2V_l)^{3/2} \Big|_{V_{l\min}}^{V_{l\max}}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

$V_{l\min}$  соответствует  $l=0$ ,  $V_{l\min} = V$ . Величина  $V_{l\max}(r) = 0$ . Для состояний с большими  $l$  точка  $r$  находится в классически недоступной области, и такие состояния вносят экспоненциально малый вклад в плотность в точке  $r$  (рис. 29).

Итак,

$$\rho(r) = \frac{1}{3\pi^2} (-2V)^{3/2}. \quad (3.36)$$

Обозначая  $-V \equiv \Phi$ , запишем уравнение Пуассона (3.26) с учетом (3.36) в следующем виде:

$$\Delta\Phi = 4\pi\rho = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \Phi^{3/2} = C\Phi^{3/2}, \quad (3.37)$$

где  $C \equiv 8\sqrt{2}/3\pi$ . Это — так называемое уравнение Тома-са—Ферми.

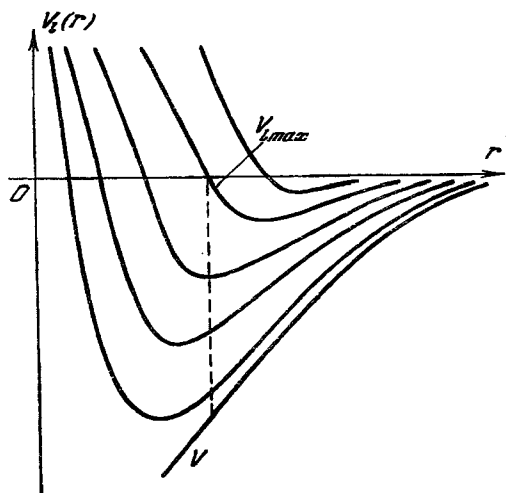


Рис. 29.

Если  $r \rightarrow 0$ , то  $\varphi \rightarrow Z/r$  — потенциал ядра. Целесообразно заменить  $\varphi(r) = Z\chi(r)/r$  с граничным условием  $\chi(0) = 1$ . В сферических координатах

$$\Delta\varphi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\varphi) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (Z\chi),$$

следовательно, из (3.37) имеем

$$\frac{Z}{r} \chi''(r) = C \frac{Z^{3/2}}{r^{3/2}} \chi^{3/2}, \quad (3.38)$$

или

$$\chi''(r) = C \frac{Z^{1/2}}{r^{1/2}} \chi^{3/2}. \quad (3.39)$$

Введем новую переменную  $x = \alpha Z^{1/3} r$  ( $\alpha$  выберем позже) с целью получить универсальное уравнение для функции  $\chi$ . Тогда из (3.39) находим

$$\alpha^2 Z^{2/3} \chi'' = CZ^{1/2} \frac{1}{x^{1/2}} \alpha^{1/2} Z^{1/6} \chi^{3/2},$$



или, если выбрать  $C = \alpha^{3/2}$ , т. е.  $\alpha = \left(\frac{8\sqrt{2}}{3\pi}\right)^{2/3}$ , то окончательно находим

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\chi}{dx^2} &= \frac{1}{\sqrt{x}} \chi^{3/2}, \\ \chi(\infty) &= 0, \quad \chi(0) = 1. \end{aligned} \right\} \quad (3.40)$$

Уравнение (3.40) решается численно (в 1.1 дано приближенное его решение). Решение его определяет распределение плотности электронов. Характерный радиус этого распределения в безразмерных единицах  $x \sim 1$ , следовательно, в обычных единицах  $a_{т.ф.} \sim a_0 / \sqrt[3]{Z}$ . На этом расстоянии находится большинство электронов. Полученный результат совпадает с приближенной оценкой, приведенной на стр. 38.

Уравнение (3.40) справедливо в той области атома, где применимо квазиклассическое приближение.

**Задача.** Начиная с каких и до каких расстояний применимо распределение Томаса — Ферми?

**Ответ.**  $r_{\min} \sim 1/Z$ ,  $r_{\max} \sim 1$ .

### Оценки ядерных матричных элементов

В теории ядра часто приходится вычислять различные суммы матричных элементов. Рассмотрим, какие матричные элементы вносят наибольший вклад в такие суммы.

Пусть  $U(r)$  — величина, заметно изменяющаяся на расстояниях порядка радиуса ядра. Оценим квазиклассически матричный элемент  $U_{\lambda_1\lambda_2} = (\varphi_{\lambda_1} U \varphi_{\lambda_2})$ , где  $\varphi_{\lambda}$  — волновая функция нуклона в самосогласованном поле, создаваемом всеми остальными нуклонами ядра,  $\lambda$  — совокупность квантовых чисел, описывающих состояние нуклона.

Рассмотрим сначала сферическое ядро. Тогда  $\lambda \equiv n, j, l, m$ , где  $n$  — радиальное,  $l$  — орбитальное и  $m$  — магнитное квантовые числа,  $j = l \pm \frac{1}{2}$ . Покажем, что соседние уровни в сферическом ядре не комбинируют между собой, т. е. дают малое значение матричного элемента  $U_{\lambda_1\lambda_2}$ . Предварительно оценим расстояние между соседними уровнями. В деформированном ядре уровни с различными проекциями

момента на ось симметрии расщеплены, поэтому если  $A$  — число нуклонов в ядре, а  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми, т. е. энергетическое расстояние от дна самосогласованной ямы до места заполнения последних нуклонов, то среднее расстояние между одночастичными уровнями имеет порядок  $\varepsilon_F/A$ . Величина  $\varepsilon_F$  не зависит от  $A$  с той точностью, с которой постоянна плотность  $n$  ядерного вещества. Действительно, в системе, которая удерживается силами, действующими между ее частицами, радиус действия сил и среднее расстояние между частицами имеют одинаковый порядок величины. Поэтому все величины, характеризующие ядро, можно выразить с помощью размерных оценок друг через друга. В частности,  $\varepsilon_F \sim n^{2/3}$  ( $M = \hbar = 1$ ).

В сферическом ядре существует вырождение по проекции углового момента с кратностью порядка величины углового момента  $l \sim p_F R$ , где  $R$  — радиус ядра, а  $p_F$  — импульс нуклона на границе Ферми. Так как  $R = r_0 A^{1/3}$ , где  $r_0$  — величина порядка среднего расстояния между нуклонами, то  $p_F R = p_F r_0 A^{1/3} \sim A^{1/3}$ . Следовательно, среднее расстояние между ближайшими уровнями сферического ядра имеет порядок величины  $\varepsilon_F/A^{2/3}$ .

Оценим сначала расстояние между уровнями, отличающимися лишь радиальными квантовыми числами  $n$ , причем  $\delta n \sim 1$ . Для этого продифференцируем по  $n$  условие квантования Бора  $\int p_r dr = n$ , где  $p_r$  — радиальный импульс. Получаем

$$1 = \int \frac{\partial p_r}{\partial n} dr = \int \frac{\partial p_r}{\partial \varepsilon_{nl}} \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} dr \sim \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \int \frac{dr}{v} \sim \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \frac{R}{v},$$

где  $\varepsilon_{nl}$  — уровень энергии, а  $v = \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial p_r}$  — скорость нуклона.

Отсюда

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \sim \frac{v}{R} = \frac{v}{r_0 A^{1/3}} \sim \frac{p_F v}{A^{1/3}} \sim \frac{\varepsilon_F}{A^{1/3}}.$$

Оценим теперь расстояние между уровнями, отличающимися лишь орбитальными квантовыми числами  $l$ , причем  $\delta l \sim 1$ . Для этого продифференцируем по  $l$  соотношение

$$\int p_r dr = n, \text{ учитывая, что } p_r = \sqrt{2 \left[ \varepsilon_{nl} - V(r) - \frac{(l+1/2)^2}{2r^2} \right]}.$$

Здесь  $V(r)$  — потенциальная энергия нуклона. Получаем:

$$\int \frac{dr}{p_r} \left( \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} - \frac{l}{r^2} \right) = 0,$$

т. е.

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{p_r} \sim l \int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{r^2 p_r},$$

где  $r_{\min}$  находится из условия  $p_r = 0$ , т. е.  $r_{\min} \sim l/p_F$ .

В интеграле  $\int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{p_r}$  существенна вся область интегрирования, поэтому мы его оцениваем как  $R/v$ . В интеграле же

$\int_{r_{\min}}^R \frac{dr}{r^2 p_r}$  основной вклад вносится областью вблизи  $r_{\min}$ ,

поэтому его оценка  $1/r_{\min} p_F \sim 1/l$ . Итак,  $\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \cdot \frac{R}{v} \sim l \frac{1}{l} = 1$ ,

т. е.  $\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \sim \varepsilon_F / A^{1/3}$ .

Таким образом, мы получили, что

$$\frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \sim \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \sim \varepsilon_F A^{-1/3}.$$

Поэтому уровень сферического ядра, ближайший к данному, т. е. отстоящий от него на расстоянии  $\varepsilon_F / A^{2/3}$ , получается, как правило, за счет больших изменений  $\delta n$  и  $\delta l$ , так чтобы величина

$$\delta \varepsilon_{nl} = \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial n} \delta n + \frac{\partial \varepsilon_{nl}}{\partial l} \delta l$$

была минимальна.

Для этого нужно выбрать  $\delta n, \delta l \sim A^{1/3}$ . Следовательно, ближайшие уровни сферического ядра, как правило, сильно отличаются по числу узлов радиальной и угловой части волновой функции, а потому дают малое значение матричного элемента  $U_{\lambda_1 \lambda_2}$ .

Состояния с энергиями  $|\varepsilon_{\lambda_1} - \varepsilon_{\lambda_2}| \gg \varepsilon_F / A^{1/3}$  также дают малое значение  $U_{\lambda_1 \lambda_2}$ , так как функции  $\varphi_{\lambda_1}$  и  $\varphi_{\lambda_2}$  сильно различаются по числу узлов,

Итак, матричный элемент  $U_{\lambda_1 \lambda_2}$  заметно отличен от нуля для  $\lambda_1 = \lambda_2$  (если он при этом не равен строго нулю из-за правил отбора) и для  $|\varepsilon_{\lambda_1} - \varepsilon_{\lambda_2}| \sim \varepsilon_F A^{-1/3}$ , когда числа узлов функций  $\varphi_{\lambda_1}$  и  $\varphi_{\lambda_2}$  мало различаются.

Все сказанное выше о комбинирующих уровнях остается в силе и для деформированного ядра, если оператор  $U$  меняет квантовые числа  $n$  и  $l$ . Если же  $U$  меняет лишь магнитное квантовое число  $m$  (например, оператор углового момента), то комбинируют уровни с соседними  $m$ , принадлежащие одному мультиплету  $nl$ . Оценим расстояние между ними. Выше (см. стр. 75) было показано, что в первом порядке теории возмущений расщепление уровней определяется соотношением

$$\varepsilon_{nlm} = \varepsilon_{nl} + \varepsilon_{nl} \beta \left( \frac{m^2}{l^2} - \frac{1}{3} \right),$$

где  $\beta$  — величина деформации. Следовательно,

$$\frac{\partial \varepsilon_{nlm}}{\partial m} \sim \varepsilon_{nl} \beta \frac{m}{l^2} \sim \varepsilon_F \beta A^{-1/3},$$

т. е. в этом случае могут комбинировать и близкие уровни (при малых  $\beta$ ).

### Нецентральный потенциал

Рассмотрим более общий случай, когда переменные не разделяются, и построим в этом случае квазиклассическое решение. Ищем решение уравнения

$$\Delta \Psi + k^2 \Psi = 0$$

в виде  $\Psi = A e^{iS}$ . Тогда

$$\nabla \Psi = (\nabla A + i A \nabla S) e^{iS},$$

$$\Delta \Psi = (\Delta A + 2i \nabla A \nabla S + i A \Delta S - A (\nabla S)^2) e^{iS};$$

следовательно,

$$\Delta A + 2i \nabla A \nabla S - A (\nabla S)^2 + i A \Delta S + k^2 A = 0. \quad (3.41)$$

Разделяя действительную и мнимую части, из (3.41) получаем два уравнения

$$\Delta A + k^2 A = A (\nabla S)^2, \quad (3.42)$$

$$2 \nabla A \nabla S + A \Delta S = 0. \quad (3.43)$$

Уравнение (3.43) означает закон сохранения тока частиц. Действительно,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} &= \frac{1}{2} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \\ &= \frac{1}{2i} [Ae^{-iS} \nabla (Ae^{iS}) - \\ &\quad - Ae^{iS} (\nabla Ae^{-iS})] = A^2 \nabla S \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{j} &= \nabla (A^2 \nabla S) = \\ &= A^2 \Delta S + 2 \nabla A \nabla S \cdot A = 0. \end{aligned}$$

Следовательно, вдоль линии тока

$$j_1 d\sigma_1 = j_2 d\sigma_2, \quad (3.44)$$

где  $d\sigma_1$  и  $d\sigma_2$  — нормальные элементы площади трубки тока (рис. 30).

Если  $\Delta A/A \ll k^2$ , то из (3.42) следует уравнение Гамильтона — Якоби для  $S$ :

$$2 [E - V(r)] = (\nabla S)^2. \quad (3.45)$$

### Квазиклассическая задача рассеяния

Построим квазиклассическую волновую функцию для задачи рассеяния. Предварительно заметим, что уравнение (3.45) содержит не одно решение: в любую точку в  $+\infty$ , куда устремляются частицы после рассеяния, частица может прийти по меньшей мере двумя путями. Это изображено на рис. 31. Здесь 1 и 2 — две точки фронта падающей волны.

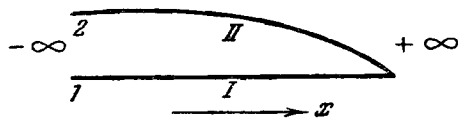


Рис. 31.

Поэтому на основе принципа суперпозиции вместо решения  $\Psi = Ae^{iS}$  мы должны потребовать  $\Psi = \sum_i A_i e^{iS_i}$ , где сумма берется по всем классическим траекториям, соединяющим рассматриваемые точки.

Предположим для простоты, что есть только две траектории, соединяющие фронты падающей и рассеянной волн на бесконечности. Вдоль траектории 1, которая проходит вдали от центра рассеяния, трубка тока параллельна оси  $x$ ;

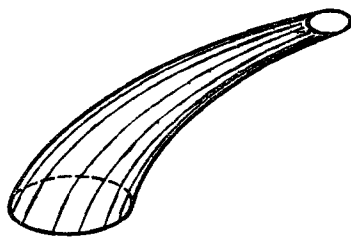


Рис. 30.

$A$  и  $\nabla S$  постоянны, причем  $\nabla S = p_0$ . Можно положить, что значение  $\Psi$ -функции в каждой точке фронта падающей волны равно 1. Поэтому  $A_1 = A_2 = 1$ . Следовательно,

$$\Psi_1 = \exp \left[ i \int_{-L}^x p_0 dx \right] = \exp (ip_0 x + ip_0 L),$$

где  $L$  — пока произвольное число. Найдем второе решение  $\Psi_2$ . Вдоль второй трубки тока  $A^2 \nabla S d\sigma = \text{const}$ . На  $-\infty$  имеем  $A_2 = 1$ ,  $\nabla S = p_0$ ,  $d\sigma = \rho d\rho d\varphi$ , где  $\rho$  — прицельный параметр. Следовательно,

$$p_0 \rho d\rho d\varphi = A_2^2 p_0 r^2 d\Omega. \quad (3.46)$$

Тогда

$$\Psi_2 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_2 e^{iS_2} = \sqrt{\frac{\rho d\rho d\varphi}{r^2 d\Omega}} \exp \left[ i \int_{-L}^r p dl \right],$$

а полное решение задачи имеет вид

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp (ip_0 x + ip_0 L) + \sqrt{\frac{\rho d\rho d\varphi}{r^2 d\Omega}} \exp \left[ i \int_{-L}^r p dl \right]. \quad (3.47)$$

Умножим правую часть этого равенства на постоянный множитель  $e^{-ip_0 L}$ :

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 x} + \sqrt{\frac{\rho d\rho d\varphi}{r^2 d\Omega}} \exp i \left[ p_0 r + \int_{-L}^r p dl - \int_{-L}^r p_0 dl - p_0 L \right],$$

или  $\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ip_0 x} + \frac{f}{r} e^{ip_0 r}$ , где

$$f = \sqrt{\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кл}}} e^{i\Phi}, \quad (3.48)$$

$$\Phi \equiv \int_{-\infty}^{\infty} p dl - \int_{-\infty}^{\infty} p_0 dl_0. \quad (3.49)$$

Траектории  $l$  и  $l_0$  изображены на рис. 32.

В выражении (3.49) фактически существенное значение имеют точки вблизи центра рассеяния. Выражение (3.49) требует уточнения в том случае, когда классическая траектория проходит вблизи точек, где квазиклассика неприме-

нима. Совокупность таких точек образует поверхность, называемую каустикой. Каустика отделяет область, доступную для классического движения, от недоступной. Например, для отталкивательного кулоновского потенциала каустика имеет вид параболоида вращения. В случае притягивательного кулоновского потенциала она представляет собой прямую линию, идущую от центра рассеяния к  $+\infty$ .

Найдем, как меняется фаза волновой функции вблизи касания траектории с каустикой.

Разложим движение частицы на два движения: перпендикулярно касательной к каустике и вдоль касательной. Движение в перпендикулярном направлении аналогично квазиклассическому отражению от точки поворота в одномерной задаче. При этом разность фаз падающей и отраженной волны, как мы видели, равна  $\pi/4 - (-\pi/4) = \pi/2$ . При движении вдоль касательной к каустике изменения фазы не происходит. Следовательно, вместо (3.49) для  $\Phi$  получается следующее выражение:

$$\Phi = \int_{-\infty}^{\infty} p dl - \int_{-\infty}^{\infty} p_0 dl_0 + iv \frac{\pi}{2},$$

где  $v$  — число точек касания с каустикой. В случае кулоновского потенциала  $v = 1$ .

### Сечение рассеяния протона на атоме водорода

При рассмотрении задачи о перезарядке (см. стр. 103) было получено, что амплитуда рассеяния  $f_1 = 1/2(f_s + f_a)$ , а амплитуда перезарядки  $f_2 = 1/2(f_s - f_a)$ , где  $f_s$ ,  $f_a$  — амплитуды соответственно симметричного и антисимметричного рассеяния.

Потенциал  $V_s$  мало отличается от  $V_a$ , поэтому классическое сечение можно считать одинаковым для  $V_s$  и  $V_a$ , между тем как фазы  $\Phi_s$  и  $\Phi_a$  могут сильно различаться. Действительно,  $\Phi_s$ ,  $\Phi_a$  — очень большие числа, поэтому и  $\Phi_s - \Phi_a$  может быть велико.

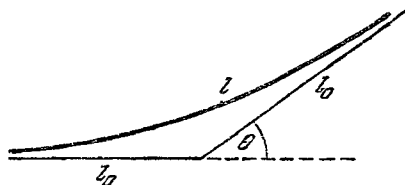


Рис. 32.

Следовательно, согласно (3.48)

$$f_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}}} (e^{i\Phi_s} + e^{i\Phi_a}), \quad f_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}}} (e^{i\Phi_s} - e^{i\Phi_a}).$$

Сечение перезарядки равно

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{перез}} &= |f|^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} |e^{i\Phi_s} - e^{i\Phi_a}|^2 = \\ &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \sin^2 \frac{1}{2} (\Phi_s - \Phi_a). \end{aligned}$$

Так как

$$\Phi \equiv \int_{-\infty}^{\infty} p \, dl - \int_{-\infty}^{\infty} p_0 \, dl_0,$$

то

$$\begin{aligned} \Phi_s - \Phi_a &= \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (p_s - p_a) \, dl \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m_1 (V_s - V_a)}{\rho} \, dl \approx \frac{1}{v_0} \int_{-\infty}^{\infty} (V_s - V_a) \, dl, \end{aligned}$$

где  $m_1$  — масса, а  $v_0$  — скорость протона.

Рассмотрим рассеяние на малые углы. Обозначим  $V_s - V_a \equiv V$ . Тогда для сечения перезарядки получаем следующее выражение:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{перез}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \sin^2 \left[ \frac{1}{2v_0} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) \, dx \right]. \quad (3.50)$$

Здесь  $\rho$  — прицельный параметр. Это выражение совпадает с сечением, полученным в (2.4). Для сечения рассеяния получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{расс}} &= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \cdot \cos^2 \left[ \frac{1}{2v_0} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) \, dx \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} - \frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{кл}} \cdot \cos \left[ \frac{1}{v_0} \int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{\rho^2 + x^2}) \, dx \right]. \end{aligned}$$

Таким образом, наряду с обычным классическим рассеянием получают квантовомеханические осцилляции сечения рассеяния как функции угла отклонения.