

З. ФЛЮГГЕ

Задачи по КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

ТОМ 1

Перевод с английского
кандидата физ.-мат. наук, доцента
Б. А. ЛЫСОВА

Под редакцией
доктора физ.-мат. наук, профессора
А. А. СОКОЛОВА

Издательство «Мир»
МОСКВА 1974

DIE GRUNDLEHREN DER
MATHEMATISCHEN WISSENSCHAFTEN

in Einzeldarstellungen
mit besonderer Berücksichtigung
der Anwendungsgebiete
Band 177

**Practical
Quantum Mechanics I**

by

SIEGFRIED FLÜGGE

Physikalisches Institut
der Universität Freiburg

SPRINGER-VERLAG
BERLIN — HEIDELBERG — NEW YORK
1971

Книга Флюгге представляет собой своеобразное изложение квантовой механики на базе анализа задач и примеров. Она охватывает почти все разделы квантовой механики, нашедшие большое практическое применение. Внимательно читая книгу Флюгге, можно не только изучить основы квантовой механики, но и научиться применять ее к конкретным задачам.

Книга разделена на два тома. Первый том состоит из двух глав. Первая глава посвящена основным принципам квантовой механики, а вторая — анализу многочисленных задач, связанных с движением одной бесспиновой нерелятивистской частицы. В задачах, посвященных проблеме рассеяния, приводится расчет фазовых сдвигов для парциальных волн, рассматриваются уравнение Калоджеро и полуссы Редже. Все это впервые излагается в учебной литературе.

Книга полезна студентам и преподавателям, а также широкому кругу физиков-экспериментаторов, не обладающих достаточным опытом выполнения конкретных квантовомеханических расчетов.

Редакция литературы по физике

Предисловие редактора перевода

Книга „Задачи по квантовой механике“, перевод которой предлагается вниманию советского читателя, написана немецким физиком-теоретиком старшего поколения Зигфридом Флюгге. Он начал работать еще в 30-е годы с Максом Борном, а в настоящее время уделяет большое внимание издательской деятельности, в частности как редактор широко известной многотомной „Физической энциклопедии“ (Handbuch der Physik).

Квантовую механику, как и любой другой раздел теоретической физики, невозможно изучить, ограничиваясь только рассмотрением теоретических положений. Поэтому нет ни одного курса по квантовой механике как советских, так и иностранных авторов, в котором с помощью волновых уравнений не рассматривались хотя бы основные квантовые задачи: гармонический осциллятор, ротатор, водородоподобный атом, эффект Зеемана, учет релятивистских и спиновых эффектов, атом гелия, простейшие молекулы и т. д. Более того, на базе решения этих конкретных задач и сравнения теоретических выводов с экспериментальными данными возникла сама квантовая механика; вначале она была нерелятивистской (матричная механика Гейзенберга, волновое уравнение Шредингера), а затем пришлось построить такое волновое уравнение, которое объясняло бы не только спиновые (уравнение Паули), но и релятивистские эффекты (уравнение Дирака). К сожалению, далеко не все задачи решаются точно с помощью волновых уравнений Шредингера или Дирака и т. д. Поэтому необходимо было создать еще и приближенные методы, например метод Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна (ВКБ), теорию возмущений и т. д. С помощью волновых уравнений квантовой механики находятся, как правило, так называемые стационарные состояния (без учета излучения).

Для последовательного разрешения квантовой проблемы электромагнитного излучения пришлось развить теорию вторичного квантования и применить ее к решению конкретных вопросов. В частности, на основе метода возмущений была развита квантовая теория спонтанного и вынужденного излучений, которая вначале была построена Эйнштейном с помощью принципа соответствия полуклассической боровской теории.

Чтобы изучить, а главное овладеть методами квантовой механики, явно недостаточно ограничиться волновыми уравнениями и решением с их помощью некоторых основных задач. Поэтому не удивительно, что в учебном плане университетского курса квантовой механики наряду с лекциями предусмотрены еще практические занятия, где студентов учат решать с помощью квантовой механики самые разнообразные задачи.

Если в литературе имеется достаточное количество учебников по квантовой теории, написанных советскими [1—6] и иностранными [7—10]¹⁾ авторами, то задачников по квантовой механике весьма мало. Один из первых задачников был написан Зигфридом Флюгге на немецком языке еще в 1947 г. [11]. Это пособие стало классическим задачником, которым пользовались не только иностранные, но и советские специалисты, несмотря на то, что он не был переведен на русский язык. В советской литературе имеется лишь несколько сборников задач по курсу квантовой механики, наиболее известными из которых являются задачники [12, 13]²⁾. К сожалению, они относятся к 1956—1957 гг. и несколько устарели, не говоря о том, что в них рассматриваются, как правило, только нерелятивистские задачи. Поэтому не удивительно, что появление в 1971 г. задачника по квантовой механике Флюгге всячески приветствовалось. Книга Флюгге—по существу заново переработанное и дополненное издание его задачника 1947 г. [11]. Автор вынужден был разбить новое издание на два тома, поскольку 219 задач с подробными решениями и комментариями оказалось неудобно поместить в один том. В книге Флюгге 1971 г. собрано не только значительно больше задач, чем в издании 1947 г., но, что не менее важно, помещены задачи из новых разделов квантовой механики (например, релятивистской квантовой механики и теории излучения), которые фактически отсутствовали в изданных до настоящего времени задачниках.

Глава I посвящена основным принципам квантовой механики, включая вопросы, связанные с интерпретацией математического аппарата. Здесь же рассмотрены связь между шредингеровским и гейзенберговским представлениями и переход к импульсному представлению.

Наибольший интерес в первом томе представляет гл. II, в которой собрано большое число задач, связанных с движением бесспиновой частицы в полях различного вида. В этой главе

¹⁾ Наш список учебников по квантовой механике, изданных на русском языке, является далеко не полным. Мы не приводим и соответствующую литературу, не переведенную на русский язык.

²⁾ Существует ряд задачников по теоретической физике вообще, в которых лишь весьма небольшой раздел отведен некоторым специальным задачам квантовой механики [14—16].

наряду с задачами, помещенными во многие пособия (прямоугольная потенциальная яма, гармонический и ангармонический осциллятор, момент количества движения в сферических координатах, проблема Кеплера и др.), имеется довольно много задач, связанных с использованием приближения ВКБ. Это вполне естественно ввиду возрастающей роли приближения ВКБ при изучении многих проблем квантовой механики. В конце главы разобраны задачи о движении заряженной частицы в магнитном поле.

Весьма интересна, как нам кажется, серия задач этой главы, посвященная упругому рассеянию на сферически симметричном потенциале. Автор использовал здесь результаты ряда оригинальных научных статей, сравнительно недавно появившиеся в научной периодике и не вошедшие еще в учебную литературу. Мы имеем в виду прежде всего расчет фаз рассеяния для парциальных волн методом последовательных приближений, уравнение Калоджеро, полюсы Редже, вариационный принцип Швингера и т. д.

Второй том начинается с гл. III, посвященной движению нерелятивистских частиц со спином $\frac{1}{2}$. Вся глава разбита на две части: в части А рассматриваются одночастичные задачи, в части Б — двух- и трехчастичные задачи.

Глава IV также разбита на две части, включающие соответственно задачи со сравнительно небольшим (часть А) и с очень большим числом частиц (часть Б). В части А рассматриваются задачи о возбужденном состоянии атома гелия, об основном состоянии лития с обменными поправками и т. д. В части Б представлены задачи, при решении которых используются методы квантовой статистики (электронный газ в металле, модель атома Томаса — Ферми и т. д.).

Глава V посвящена в основном нестационарным задачам, включая дираковскую теорию возмущения.

В гл. VI собраны задачи, связанные с релятивистским уравнением Дирака. Здесь весьма подробно разбираются проблема Кеплера с учетом релятивистских и спиновых эффектов, теория дираковских спиноров, переход к нерелятивистскому уравнению Паули и т. д.

В последней, гл. VII излагаются элементы теории вторичного квантования как нерелятивистского уравнения Шредингера, так и уравнения Максвелла — Лоренца. На основе вторичного квантования разбираются задачи, касающиеся вероятности излучения, интенсивности линий лаймановской серии в атоме водорода, эффекта Комптона и тормозного излучения.

Для удобства читателя в конце книги помещено математическое приложение справочного характера. В нем в компактном виде изложены вопросы, связанные с применением различных

систем координат: сферической, параболической, цилиндрической, эллипсоидальной. Здесь же даны определения и приведены основные формулы для ряда специальных функций, наиболее часто встречающихся в квантовой механике (гипергеометрическая функция, Г-функция, функции Бесселя, Эйри, Лежандра и т. д.).

Подробный предметный указатель, который помещен во втором томе, позволяет быстро находить номера задач, интересующих читателя. Это особенно важно, поскольку физически родственные задачи по тем или иным методическим соображениям могут быть помещены в различные разделы.

В заключение отметим некоторые особенности книги Флюгге. Ее нельзя рассматривать как стандартный задачник, в котором лишь формулируется та или иная задача, а затем дается ответ или приводятся указания к ее решению. В книге во многих задачах развиваются соответствующие теоретические положения квантовой механики, причем сами задачи снабжены весьма подробными решениями, а результаты проиллюстрированы числовыми примерами и графиками, что несомненно облегчает их понимание. Теория, развиваемая при решении задач, практически охватывает курс квантовой механики (примерно в объеме университетской программы), включая ее принципиальные законы. Поэтому, внимательно читая книгу Флюгге, можно не только изучить квантовую механику, но и научиться применять ее к конкретным задачам. Потребность в руководствах такого рода в последние годы стала особенно острой, поскольку квантовая механика находит применение во все более широких областях физики, а контингент лиц, изучающих ее, быстро возрастает. Поэтому мы надеемся, что выпускаемая на русском языке книга Флюгге будет полезна не только студентам различных вузов, изучающим теоретическую физику, а также преподавателям, ведущим занятия по квантовой механике, но и широкому кругу физиков-экспериментаторов, не обладающих достаточным опытом при выполнении конкретных квантовомеханических расчетов.

Мы сочли возможным внести в текст некоторых задач небольшие изменения с целью устранить замеченные в процессе перевода неточности и опечатки. Кроме того, там, где автор цитирует малоизвестные у нас монографии, пришлось дать дополнительные ссылки на доступные советскому читателю книги, в которых разбираются соответствующие вопросы.

Конечно, книгу Флюгге можно было бы дополнить более сложными задачами, связанными, например, с ролью симметрии в квантовой механике, или задачами, решение которых опирается на теорию абстрактного гильбертова пространства. Однако это значительно увеличило бы объем, тем более что многие близкие вопросы изложены в специальной литературе, носящей характер задачников (см., например, [17]). Во всяком случае, еще раз

повторяем, что книга Флюгге будет полезна всем физикам, которые не только хотят изучить принципиальные вопросы квантовой механики, но и желают научиться применять их к решению конкретных задач.

А. А. Соколов

Москва, июнь 1973 г.

Литература

1. *Блохинцев Д. И.*, Основы квантовой механики, изд-во „Высшая школа“, 1963.
2. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.*, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
3. *Соколов А. А., Лоскутов Ю. М., Тернов И. М.*, Квантовая механика, изд-во „Просвещение“, 1965.
4. *Соколов А. А., Тернов И. М.*, Квантовая механика и атомная физика, изд-во „Просвещение“, 1970.
5. *Матвеев А. Н.*, Квантовая механика и строение атома, изд-во „Высшая школа“, 1965.
6. *Давыдов А. С.*, Квантовая механика, изд. 2-е, перераб., изд-во „Наука“, 1973.
7. *Ферми Э.*, Квантовая механика, изд-во „Мир“, 1968.
8. *Зоммерфельд А.*, Строение атома и спектры, т. 1 и 2, Гостехиздат, 1956.
9. *Шифф Л.*, Квантовая механика, ИЛ, 1959.
10. *Морс Ф., Фейсбах Г.*, Методы теоретической физики, т. 1 и 2, ИЛ, 1958, 1960.
11. *Flügge S.*, Rechenmethoden der Quantentheorie dargestellt in Aufgaben und Lösungen, Springer, Berlin, 1947.¹⁾
12. *Гольдман И. И., Кривченко В. Д.*, Сборник задач по квантовой механике, Гостехиздат, 1957.
13. *Коган В. И., Галицкий В. М.*, Сборник задач по квантовой механике, Гостехиздат, 1956.
14. *Иродов И. Е.*, Сборник задач по атомной и ядерной физике, Атомиздат, 1971.
15. *Скачков С. В.* и др., Сборник задач по ядерной физике, Физматгиз, 1963.
16. Фейнмановские лекции по физике (Задачи и упражнения с ответами и решениями), изд-во „Мир“, 1969.
17. *Халмош П.*, Гильбертово пространство в задачах, изд-во „Мир“, 1970.

¹⁾ Второе (1952 г.) и третье (1965 г.) издания написаны З. Флюгге совместно с Г. Маршаллом.

Предисловие автора

Впервые эта книга под названием *Rechenmethoden der Quantentheorie*¹⁾ была издана в 1947 г. в Германии. Она была предназначена студентам, только еще приступающим к изучению квантовой механики, и тем специалистам-экспериментаторам, которые ранее никогда не пользовались ею в качестве рабочего аппарата. Книга имела цель помочь тем и другим научиться применять общую теорию к практическим задачам атомной физики. С тех давних пор было написано много прекрасных книг, служащих введением в общую теорию и необходимых для более глубокого понимания предмета. Однако нам кажется, что при этом чисто практическая сторона дела в какой-то мере была упущена из виду, если, конечно, не говорить о тех многочисленных монографиях, где со всеми подробностями освещаются отдельные специальные вопросы. Иными словами, мы до сих пор все еще, по-видимому, не имеем всестороннего практического руководства по квантовой механике, и такое пособие могло бы оказаться полезным.

Надеясь заполнить указанный пробел, автор пошел навстречу желанию издателей, предложивших модернизировать старое немецкое издание и написать новый вариант книги на английском языке с тем, чтобы сделать ее более доступной широким кругам студенческой и научной общественности.

С самого начала не могло быть никаких сомнений в том, что объем книги должен значительно возрасти. Нужно было добавить новые приближенные методы и другие новейшие достижения, в особенности относящиеся к проблеме рассеяния. Кроме того, нам казалось необходимым включить в книгу релятивистскую квантовую механику и хотя бы бегло затронуть теорию излучения, как пример квантования волновых полей. Наконец, сам подбор задач, бывший ранее в известной мере случайным, нуждался теперь в тщательном пересмотре.

В итоге число задач по сравнению с последним немецким изданием возросло почти вдвое. Ни одна из них не является простым переводом первоначальной задачи, и примерно лишь 50 задач

¹⁾ Методы решения задач по квантовой механике. — *Прим. ред.*

возникло в результате переработки первоначального текста. Таким образом, подавляющее большинство задач публикуется здесь впервые. Тем не менее общий характер книги остался прежним, но теперь тенденция иметь в конце каждой задачи пригодные для обсуждения буквенные результаты и числовые значения, как нам кажется, выражена отчетливее.

Мы не стали исключать более элементарные задачи, такие, как задача о частице в прямоугольной яме, но несколько сократили их объем. Общее введение к немецкому изданию, что-то около 20 страниц, посвященных основным уравнениям и их интерпретации, в этом издании опущено. Любой студент, пользующийся задачником, достаточно знаком с предметом, поэтому такой шаг вполне оправдан. Однако нам казалось, что читателям принесет пользу математическое приложение, где собраны и частично выведены формулы, относящиеся к специальным функциям, которые широко используются на протяжении всей книги.

Не без колебаний согласился автор с практическими доводами издателей, пожелавших иметь настоящее издание книги в виде двух отдельных томов, надеясь, что этот шаг не нанесет серьезного ущерба ее внутренней структуре и единству.

Хинтерцартен, март 1971

Содержание

| | |
|--|----|
| Предисловие редактора перевода | 5 |
| Предисловие автора | 11 |

I. Общие принципы

| | |
|--|----|
| 1. Закон сохранения вероятности | 17 |
| 2. Вариационный принцип Шредингера | 18 |
| 3. Классическая механика для пространственных средних | 21 |
| 4. Классические законы для момента количества движения | 22 |
| 5. Закон сохранения энергии | 23 |
| 6. Эрмитово сопряжение | 24 |
| 7. Построение эрмитова оператора | 25 |
| 8. Дифференцирование оператора | 28 |
| 9. Изменение средних значений со временем | 29 |
| 10. Картина Шредингера и картина Гейзенберга | 30 |
| 11. Гамильтониан, зависящий от времени | 32 |
| 12. Повторное измерение | 33 |
| 13. Криволинейные координаты | 35 |
| 14. Волновые функции в импульсном представлении | 36 |
| 15. Пространство импульсов. Периодические и непериодические волновые функции | 38 |

II. Одночастичные задачи без учета спина

| | |
|---|----|
| A. Одномерные задачи | 40 |
| 16. Фундаментальные решения в случае свободного движения | 40 |
| 17. Волновой пакет в случае свободного движения | 43 |
| 18. Стоячие волны | 46 |
| 19. Полупроницаемая перегородка | 49 |
| 20. Полупроницаемая перегородка в виде δ -образного потенциального барьера | 53 |
| 21. Рассеяние на δ -образном потенциальном барьере | 55 |
| 22. Рассеяние на симметричном потенциальном барьере | 56 |
| 23. Отражение от прямоугольного барьера | 58 |
| 24. Инверсия отражения | 60 |
| 25. Прямоугольная потенциальная яма | 62 |
| 26. Прямоугольная потенциальная яма между двумя бесконечными стенками | 66 |
| 27. Виртуальные уровни | 70 |
| 28. Периодический потенциал | 75 |
| 29. Дираковская потенциальная гребенка | 78 |

| | |
|---|------------|
| 30. Гармонический осциллятор | 81 |
| 31. Осциллятор в абстрактном гильбертовом пространстве (осциллятор в представлении Фока) | 84 |
| 32. Использование лестничных операторов для нахождения собственных функций осциллятора | 87 |
| 33. Гармонический осциллятор в матричном представлении | 89 |
| 34. Волновые функции осциллятора в пространстве импульсов | 92 |
| 35. Ангармонический осциллятор | 93 |
| 36. Приближенные волновые функции | 97 |
| 37. Потенциальная ступенька | 99 |
| 38. Потенциальная яма Пешля—Теллера | 102 |
| 39. Модифицированная потенциальная яма Пешля—Теллера | 106 |
| 40. Свободное падение вблизи земной поверхности | 112 |
| 41. Ускоряющее электрическое поле | 116 |
| Б. Задачи с двумя или тремя степенями свободы без сферической симметрии | 118 |
| 42. Круговой осциллятор | 118 |
| 43. Эффект Штарка для двумерного ротатора | 121 |
| 44. Ион молекулы водорода | 123 |
| 45. Наклонное падение плоской волны | 128 |
| 46. Симметричный волчок | 131 |
| В. Момент количества движения | 135 |
| 47. Бесконечно малые вращения | 135 |
| 48. Момент количества движения в сферических координатах | 137 |
| 49. Момент количества движения и оператор Лапласа | 139 |
| 50. Преобразования в гильбертовом пространстве | 140 |
| 51. Коммутаторы в координатном представлении | 142 |
| 52. Частица со спином 1 | 143 |
| 53. Перестановочные соотношения компонент тензора | 144 |
| 54. Тензор квадрупольного момента. Сферические гармоники | 146 |
| 55. Преобразование сферических гармоник | 148 |
| 56. Построение собственных векторов оператора L_z в абстрактном гильбертовом пространстве | 151 |
| 57. Ортогональность сферических гармоник | 153 |
| Г. Сферически симметричные потенциалы | 154 |
| а. Связанные состояния | 154 |
| 58. Средние значения компонент момента количества движения | 156 |
| 59. Радиальная компонента оператора импульса | 159 |
| 60. Решения, близкие к собственным функциям | 161 |
| 61. Квадрупольный момент | 163 |
| 62. Частица внутри непроницаемой сферы | 165 |
| 63. Сферически симметричная прямоугольная яма конечной глубины | 168 |
| 64. Потенциал Вуда—Саксона | 171 |
| 65. Изотропный осциллятор | 175 |
| 66. Вырожденные состояния изотропного осциллятора | 177 |
| 67. Проблема Кеплера | 180 |
| 68. Потенциал Хюльтена | 184 |
| 69. Молекулярный потенциал Кратцера | 187 |
| 70. Потенциал Морса | 191 |
| 71. Ротационные поправки к формуле Морса | 196 |
| 72. Потенциал Юкавы | 198 |

| | |
|---|------------|
| 73. Изотопический сдвиг границы рентгеновского излучения | 200 |
| 74. Основное состояние мезоатома | 202 |
| 75. Модель дейтрона с центральным взаимодействием | 205 |
| 76. Импульсное представление для волновых функций в поле центральных сил | 210 |
| 77. Уравнение Шредингера в импульсном представлении в поле центральных сил | 212 |
| 78. Водородные волновые функции в импульсном пространстве | 214 |
| 79. Штарк-эффект у пространственного ротатора | 215 |
| 6. Упругое рассеяние | 217 |
| 80. Интерференция падающей и рассеянной волн | 217 |
| 81. Разложение плоской волны по парциальным волнам | 220 |
| 82. Разложение амплитуды рассеяния по парциальным волнам | 223 |
| 83. Рассеяние при низких энергиях | 225 |
| 84. Рассеяние на сферически симметричном прямоугольном потенциальном барьере | 227 |
| 85. Аномальное рассеяние | 232 |
| 86. Рассеяние на резонансных уровнях | 235 |
| 87. Вклад состояний с высшими значениями момента количества движения | 239 |
| 88. Приближение, не зависящее от формы потенциала | 241 |
| 89. Низкоэнергетическое рассеяние на сферически симметричной прямоугольной яме | 245 |
| 90. Низкоэнергетическое рассеяние и связанные состояния | 247 |
| 91. Дейтронный потенциал с жесткой сердцевиной и без нее | 249 |
| 92. Низкоэнергетическое рассеяние при наличии жесткой сердцевины и без нее | 252 |
| 93. Низкоэнергетическое рассеяние на модифицированном потенциале Пешля — Теллера | 253 |
| 94. Радиальное интегральное уравнение | 256 |
| 95. Вариационный принцип Швингера | 260 |
| 96. Последовательные приближения для фазы рассеяния | 263 |
| 97. Уравнение Калоджеро | 266 |
| 98. Линеаризация уравнения Калоджеро | 268 |
| 99. Длина рассеяния потенциала, имеющего вид степенной функции | 269 |
| 100. Второе приближение к уравнению Калоджеро | 272 |
| 101. Длина рассеяния для сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямы | 275 |
| 102. Длина рассеяния потенциала Юкавы | 277 |
| 103. Улучшение сходимости рядов сферических гармоник | 280 |
| 104. Интеграл по прицельному расстоянию | 282 |
| 105. Борновское рассеяние. Последовательные приближения | 284 |
| 106. Рассеяние на потенциале Юкавы | 287 |
| 107. Рассеяние на экспоненциальном потенциале | 290 |
| 108. Борновское приближение для рассеяния на сферически симметричном распределении заряда | 294 |
| 109. Высокоэнергетическое рассеяние на жесткой сфере | 298 |
| 110. Формула Резерфорда | 300 |
| 111. Разложение кулоновской функции по парциальным волнам | 303 |
| 112. Аномальное рассеяние | 307 |
| 113. Преобразование Зоммерфельда — Ватсона | 308 |
| 114. Полус Редже | 310 |
| Д. Приближение Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (ВКБ) | 313 |
| 115. Разложение эйконала | 313 |
| 116. Применение метода ВКБ к радиальному уравнению | 315 |

| | | |
|------------------------------------|--|------------|
| 117. | Граничное ВКБ-условие Лангера | 316 |
| 118. | Гармонический осциллятор в приближении ВКБ | 321 |
| 119. | Уровни ВКБ в однородном поле | 322 |
| 120. | Проблема Кеплера в приближении ВКБ | 324 |
| 121. | Фазы ВКБ для свободного движения | 326 |
| 122. | Вычисление фаз ВКБ | 327 |
| 123. | Расчет кулоновских фаз методом ВКБ | 328 |
| 124. | Квазипотенциал | 331 |
| Е. Магнитное поле | | 332 |
| 125. | Введение магнитного поля | 332 |
| 126. | Плотность тока в присутствии магнитного поля | 334 |
| 127. | Нормальный эффект Зеемана | 336 |
| 128. | Парамагнитная и диамагнитная восприимчивости без учета спина | 338 |

I. Общие принципы

Задача 1. Закон сохранения вероятности

Вероятностная интерпретация условия нормировки

$$\int \psi^* \psi d^3x = 1, \quad (1.1)$$

при которой выражение $\psi^* \psi d^3x$ отождествляется с вероятностью обнаружить рассматриваемую частицу в элементе объема d^3x , с необходимостью приводит к закону сохранения. Найдите этот закон и обсудите возможную интерпретацию полученного результата с точки зрения классических представлений.

Решение. Искомый закон сохранения должен иметь вид уравнения непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{s} = 0, \quad (1.2)$$

где

$$\rho = \psi^* \psi \quad (1.3)$$

— плотность вероятности, а \mathbf{s} — плотность тока вероятности. Поскольку ρ — билинейная форма относительно ψ и ψ^* , уравнение (1.2) можно получить лишь в результате комбинации двух уравнений Шредингера

$$H\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad H\psi^* = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \quad (1.4)$$

с одним и тем же гамильтонианом

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

в обоих случаях. Таким образом, получаем

$$\psi^* H \psi - \psi H \psi^* = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Согласно (1.2), левая часть этого соотношения должна записываться в виде дивергенции. Действительно,

$$\psi^* H \psi - \psi H \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*),$$

поэтому можно для вектора \mathbf{s} написать

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (1.6)$$

К классической интерпретации полученного результата можно прийти, рассуждая следующим образом. Если умножить обе величины ρ и \mathbf{s} на массу частицы m , то в результате у нас получатся плотность массы ρ_m и плотность импульса \mathbf{g} :

$$\rho_m = m\rho, \quad \mathbf{g} = m\mathbf{s}, \quad (1.7)$$

тогда уравнение непрерывности естественно интерпретировать как закон сохранения массы. Точно так же, умножив на заряд частицы e , придем к плотности заряда ρ_e и к плотности электрического тока \mathbf{j} :

$$\rho_e = e\rho, \quad \mathbf{j} = e\mathbf{s}, \quad (1.8)$$

а уравнение (1.2) станет законом сохранения заряда.

Примечательно, что закон сохранения массы и закон сохранения заряда по существу идентичны, так как оба они обусловлены конвекционным током одной и той же частицы.

Выражение для полного импульса шредингеровского поля, полученное из соотношений (1.6) и (1.7),

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{g} d^3x = \frac{\hbar}{2i} \int (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) d^3x,$$

с помощью интегрирования по частям второго слагаемого можно привести к виду

$$\mathbf{p} = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi d^3x, \quad (1.9)$$

что находится в согласии с определением (см. задачу 3) среднего значения оператора импульса $(\hbar/i) \nabla$ в квантовом состоянии ψ .

Задача 2. Вариационный принцип Шредингера

Заменить уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi = E\psi \quad (2.1)$$

вариационным принципом для энергии.

Решение. Всякое решение ψ дифференциального уравнения (2.1) удовлетворяет уравнению связи¹⁾

$$\int \psi^* \psi d^3x = 1, \quad (2.2)$$

поэтому выражение для энергии получается путем умножения уравнения (2.1) на ψ^* и последующего интегрирования по всему пространству:

$$E = \int \psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi \right] d^3x. \quad (2.3)$$

¹⁾ Это утверждение верно лишь для состояний дискретного спектра.—
Прим. ред.

Интегрирование по частям первого члена с учетом формулы Грина дает

$$\int \psi^* \nabla^2 \psi d^3x = \oint \psi^* \nabla \psi df - \int (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) d^3x. \quad (2.4)$$

Далее нормировочный интеграл (2.2) существует лишь в случае, если решение ψ на больших расстояниях r убывает не медленнее, чем

$$\psi \sim r^{-3/2-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0.$$

Но при этом условии поверхностный интеграл в (2.4), взятый по поверхности бесконечно удаленной сферы, исчезает, поэтому выражение (2.3) можно записать в виде

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) + \psi^* V(r) \psi \right] d^3x. \quad (2.5)$$

Это равенство совершенно симметрично по отношению к функциям ψ и ψ^* точно так же, как и условие нормировки (2.2), и мы с таким же успехом могли бы получить его, исходя из уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V(r) \psi^* = E \psi^*, \quad (2.1a)$$

комплексно сопряженного уравнению (2.1).

Было бы нетрудно показать, что уравнения (2.1) и (2.1a) представляют собой уравнения Эйлера для вариационной задачи об экстремуме интеграла (2.5) при наличии связи (2.2). Мы, однако, не будем пользоваться аппаратом вариационного исчисления, предпочтя ему прямое доказательство.

Пусть ψ_λ — решение дифференциального уравнения (2.1), принадлежащее собственному значению E_λ . Оно дает для интеграла (2.5) значение E_λ . Заменим теперь ψ_λ на близкую функцию $\psi_\lambda + \delta\psi$, где $\delta\psi$ — малая, но произвольная вариация, если не считать условия (2.2), которому функция $\psi_\lambda + \delta\psi$ должна удовлетворять в той же мере, что и ψ_λ :

$$\int (\psi_\lambda^* + \delta\psi^*) (\psi_\lambda + \delta\psi) d^3x = 1,$$

и, следовательно,

$$\int (\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) d^3x + \int (\delta\psi^* \delta\psi) d^3x = 0. \quad (2.6)$$

После подстановки $\psi_\lambda + \delta\psi$ в интеграл (2.5) получаем для энергии выражение $E_\lambda + \delta E_\lambda$, где

$$\delta E_\lambda = \int \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \psi_\lambda^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + (\nabla \psi_\lambda) \cdot (\nabla \delta\psi^*)] + V(\psi_\lambda \delta\psi^* + \psi_\lambda^* \delta\psi) \right\} d^3x + \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \delta\psi^*) \cdot (\nabla \delta\psi) + V \delta\psi^* \delta\psi \right] d^3x. \quad (2.7)$$

В первой строке здесь собраны члены первого, а во второй — второго порядка малости. С помощью интегрирования по частям,

обратного выполненному ранее, мы можем в первой строке вернуться к выражениям $\delta\psi\nabla^2\psi_\lambda^*$ и $\delta\psi^*\nabla^2\psi_\lambda$, а затем воспользоваться уравнениями (2.1) и (2.1а) для того, чтобы избавиться от производных. В результате мы, например, получаем

$$\int \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi_\lambda^*) \cdot (\nabla\delta\psi) + V\psi_\lambda^*\delta\psi \right] d^3x = E_\lambda \int \delta\psi\psi_\lambda^* d^3x,$$

поэтому первая строка в соотношении (2.7), если учесть равенство (2.6), будет также давать вклад второго порядка малости:

$$\delta E_\lambda = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\delta\psi|^2 + (V - E_\lambda) |\delta\psi|^2 \right] d^3x. \quad (2.8)$$

Так как у нас не осталось членов, линейных по $\delta\psi$ или $\delta\psi^*$, то энергия E_λ , очевидно, будет иметь либо максимум, либо минимум при $\delta\psi = 0$, т. е. для тех ψ_λ , которые являются решениями уравнения Шредингера. Ответ на вопрос о том, что представляет собой экстремум — максимум или минимум, — зависит от знака выражения (2.8).

Чтобы несколько глубже разобраться в этом последнем вопросе, мы воспользуемся совокупностью решений $\{\psi_\lambda\}$ уравнения (2.1) и построим из них ортогональную систему функций:

$$\int \psi_\mu^*\psi_\nu d^3x = \delta_{\mu\nu}. \quad (2.9)$$

Теперь разложим по этой системе функций вариацию $\delta\psi$:

$$\delta\psi = \sum_\nu c_\nu\psi_\nu. \quad (2.10)$$

Тогда равенство (2.8) примет вид

$$\begin{aligned} \delta E_\lambda &= \sum_\mu \sum_\nu c_\mu^* c_\nu \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\psi_\mu^*) \cdot (\nabla\psi_\nu) + (V - E_\lambda) \psi_\mu^*\psi_\nu \right] d^3x = \\ &= \sum_\mu \sum_\nu c_\mu^* c_\nu \int \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi_\nu + (V - E_\lambda) \psi_\nu \right] \psi_\mu^* d^3x, \end{aligned}$$

или с учетом (2.9) и (2.1)

$$\delta E_\lambda = \sum_\mu |c_\mu|^2 (E_\mu - E_\lambda). \quad (2.11)$$

Если E_λ относится к основному состоянию, то для всех состояний ψ_μ имеем $E_\mu \geq E_\lambda$ и вариационный принцип, таким образом, дает для E_λ минимум, так как сумма (2.11) положительна. Для возбужденных состояний нельзя установить такого общего правила, так как в сумме (2.11) в этом случае содержатся как положительные, так и отрицательные слагаемые.

Задача 3. Классическая механика для пространственных средних

Показать, что основное уравнение классической ньютоновской динамики

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}, \quad (3.1)$$

где \mathbf{p} — импульс, а \mathbf{F} — сила, действующая на частицу, для пространственных средних (математических ожиданий) имеет место и в квантовой механике.

Решение. Пусть сила \mathbf{F} выражена через потенциал, $\mathbf{F} = -\nabla V$, а импульс \mathbf{p} заменен оператором $(\hbar/i)\nabla$. Интересующие нас средние определяются равенствами

$$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \nabla \psi d^3x, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{F} = - \int \psi^* (\nabla V) \psi d^3x. \quad (3.3)$$

Наша задача — показать, что интегралы (3.2) и (3.3) удовлетворяют уравнению (3.1), если функции ψ и ψ^* удовлетворяют уравнениям Шредингера

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi, \\ +\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + V\psi^*. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Доказательство мы начнем с того, что продифференцируем равенство (3.2) по времени:

$$\dot{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \int (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \psi^* \nabla \dot{\psi}) d^3x = \frac{\hbar}{i} \int (\dot{\psi}^* \nabla \psi - \dot{\psi} \nabla \psi^*) d^3x.$$

Выше мы учли, что вклад от поверхностного интеграла, появляющегося при интегрировании по частям второго слагаемого, равен нулю и его можно опустить. Избавляясь здесь от $\dot{\psi}^*$ и $\dot{\psi}$ с помощью уравнений (3.4), получаем

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int [(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*)] d^3x + \int (\psi^* V \nabla \psi + V \psi \nabla \psi^*) d^3x. \quad (3.5)$$

Интегрирование по частям

$$\int (\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) d^3x = - \int (\nabla \psi^*) (\nabla^2 \psi) d^3x$$

показывает, что оба слагаемых в первом интеграле из (3.5) взаимно сокращаются. Применяя далее интегрирование по частям к последнему из оставшихся в (3.5) слагаемому, получаем

$$\mathbf{p} = \int \psi^* [V \nabla \psi - \nabla (V \psi)] d^3x.$$

Воспользовавшись в заключение формулой

$$\nabla(V\psi) = V\nabla\psi + \psi\nabla V,$$

приходим к уравнению

$$\dot{\mathbf{p}} = - \int \psi^* (\nabla V) \psi d^3x = \mathbf{F},$$

в справедливости которого требовалось убедиться.

Задача 4. Классические законы для момента количества движения

Показать, что для пространственных средних классическая связь между моментом количества движения $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ и моментом силы $\mathbf{T} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$ (здесь \mathbf{p} означает импульс, а \mathbf{F} —силу)

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{T} \quad (4.1)$$

имеет место и в квантовой механике.

Решение. Как и в предыдущей задаче, начнем с определения пространственных средних:

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla) \psi d^3x, \quad (4.2)$$

$$\mathbf{T} = - \int \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla V) \psi d^3x. \quad (4.3)$$

Снова предполагается, что волновые функции ψ и ψ^* удовлетворяют уравнениям Шредингера (3.4).

Наше доказательство мы начнем с дифференцирования по времени равенства (4.2):

$$\dot{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \int [\dot{\psi}^* (\mathbf{r} \times \nabla \psi) + \psi^* (\mathbf{r} \times \nabla \dot{\psi})] d^3x.$$

Преобразуем второе слагаемое с помощью тождества

$$\psi^* \nabla \dot{\psi} = \nabla (\psi^* \dot{\psi}) - \dot{\psi} \nabla \psi^*$$

и учтем, что к первому члену правой части этого тождества в дальнейшем можно применить общую формулу векторного анализа

$$\int \mathbf{r} \times \nabla f d^3x = 0, \quad (4.4)$$

где $f = \psi^* \dot{\psi}$. Это дает

$$\dot{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{i} \int \mathbf{r} \times (\dot{\psi}^* \nabla \psi - \dot{\psi} \nabla \psi^*) d^3x.$$

Избавляясь теперь от $\dot{\psi}^*$ и $\dot{\psi}$ с помощью уравнений (3.4), получаем

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{L}} = & - \frac{\hbar^2}{2m} \int \mathbf{r} \times [(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*)] d^3x + \\ & + \int V \mathbf{r} \times (\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*) d^3x. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Так как

$$(\nabla^2 \psi^*) (\nabla \psi) + (\nabla^2 \psi) (\nabla \psi^*) = \nabla [(\nabla \psi^*) (\nabla \psi)],$$

то выражение, стоящее в скобках под знаком первого интеграла, является градиентом скалярной функции $f = (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi)$, поэтому этот интеграл, согласно (4.4), исчезает. Выражение, стоящее в скобках под знаком второго интеграла, равно $\nabla (\psi^* \psi)$. Используя далее тождество

$$V \nabla (\psi^* \psi) = \nabla (V \psi^* \psi) - \psi^* \psi \nabla V$$

и снова прибегая к помощи формулы (4.4), где $f = V \psi^* \psi$, окончательно преобразуем второй интеграл к виду

$$\int \mathbf{r} \times [V \nabla (\psi^* \psi)] d^3x = - \int \mathbf{r} \times (\psi^* \psi \nabla V) d^3x,$$

что совпадает, как это и требовалось доказать, с выражением (4.3) для среднего значения момента силы.

Задача 5. Закон сохранения энергии

Пусть энергия шредингеровского волнового поля описывается интегралом (2.5) из задачи 2, в этом случае закон сохранения энергии должен иметь вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0, \quad (5.1)$$

где W — плотность энергии, а \mathbf{S} — плотность потока энергии. Требуется вывести указанный закон сохранения, сконструировав подходящий вектор Умова — Пойнтинга \mathbf{S} .

Решение. Как было найдено, согласно (2.5)

$$E = \int W d^3x, \quad (5.2)$$

где

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi^*) (\nabla \psi) + \psi^* V \psi. \quad (5.3)$$

Здесь первый член — плотность кинетической, а второй — плотность потенциальной энергий. В соответствии с уравнением (5.1) нам нужна производная

$$\dot{W} = \frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla \dot{\psi}^*) (\nabla \psi) + (\nabla \psi^*) (\nabla \dot{\psi})] + V (\dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}). \quad (5.4)$$

Так как

$$(\nabla \dot{\psi}^*) (\nabla \psi) = \nabla (\dot{\psi}^* \nabla \psi) - \dot{\psi}^* \nabla^2 \psi$$

и

$$(\nabla \psi^*) (\nabla \dot{\psi}) = \nabla (\dot{\psi} \nabla \psi^*) - \dot{\psi} \nabla^2 \psi^*,$$

то мы можем преобразовать ту часть выражения (5.4), которая

обусловлена кинетической энергией, и написать

$$\dot{W} = \nabla \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \dot{\psi} \nabla \psi^*) \right] - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\psi}^* \nabla^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \dot{\psi} \nabla^2 \psi^* + \dot{\psi}^* V \psi + \dot{\psi} V \psi^*. \quad (5.5)$$

Уравнения Шредингера (3.4) позволяют нам в последних слагаемых заменить пространственные производные и потенциал производными по времени. Результирующие члены в точности сокращаются друг с другом:

$$\dot{\psi}^* \left(-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} \right) + \dot{\psi} \left(\frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^* \right) = 0,$$

так что уравнение (5.5) действительно совпадает по форме с уравнением (5.1), а искомым вектор Умова—Пойнтинга \mathbf{S} равен

$$\mathbf{S} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\dot{\psi}^* \nabla \psi + \dot{\psi} \nabla \psi^*). \quad (5.6)$$

Задача 6. Эрмитово сопряжение

Оператор Ω^\dagger , эрмитово сопряженный с оператором Ω , определяется равенством

$$\int (\Omega \psi)^* \varphi \, d\tau = \int \psi^* \Omega^\dagger \varphi \, d\tau, \quad (6.1a)$$

которое с помощью символики функционального анализа можно записать в виде

$$\langle \Omega \psi \mid \varphi \rangle = \langle \psi \mid \Omega^\dagger \varphi \rangle. \quad (6.1b)$$

Здесь ψ и φ —произвольные функции, подчиняющиеся условию нормировки:

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = 1, \quad \langle \varphi \mid \varphi \rangle = 1. \quad (6.2)$$

Сформулируйте данное определение на языке матричного представления. Что вы можете сказать о собственных значениях эрмитова оператора, определенного равенством $\Omega = \Omega^\dagger$?

Решение. Матричное представление оператора определяется выбором полного набора ортонормированных функций $\{u_\nu\}$:

$$\langle u_\nu \mid u_\mu \rangle = \delta_{\nu\mu}. \quad (6.3)$$

Для произвольных нормированных функций ψ и φ имеют место разложения:

$$\psi = \sum_\nu a_\nu u_\nu, \quad \varphi = \sum_\mu b_\mu u_\mu. \quad (6.4)$$

Подставляя разложения (6.4) в определение (6.1), получаем

$$\sum_\mu \sum_\nu a_\nu^* b_\mu \langle \Omega u_\nu \mid u_\mu \rangle = \sum_\mu \sum_\nu a_\nu^* b_\mu \langle u_\nu \mid \Omega^\dagger \mid u_\mu \rangle.$$

Предполагается, что это равенство справедливо для любой пары функций ψ и ϕ , поэтому оно должно выполняться для каждого слагаемого в отдельности:

$$\langle \Omega u_\nu | u_\mu \rangle = \langle u_\nu | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle. \quad (6.5)$$

Используем теперь полный набор $\{u_\nu\}$ для определения матрицы оператора Ω^\dagger , переписав правую часть равенства (6.5) в виде

$$\langle u_\nu | \Omega^\dagger | u_\mu \rangle = (\Omega^\dagger)_{\nu\mu}.$$

Что касается левой части, то ее можно преобразовать следующим образом:

$$\langle \Omega u_\nu | u_\mu \rangle = \int (\Omega u_\nu)^* u_\mu d\tau = \left[\int u_\mu^* (\Omega u_\nu) d\tau \right]^* = \langle u_\mu | \Omega | u_\nu \rangle^* = \Omega_{\mu\nu}^*.$$

Следовательно, матричные элементы матриц Ω и Ω^\dagger , согласно (6.5), должны быть связаны соотношением

$$(\Omega^\dagger)_{\mu\nu} = \Omega_{\nu\mu}^*. \quad (6.6)$$

Иначе говоря, элементы эрмитово сопряженной матрицы Ω^\dagger получаются из элементов матрицы Ω с помощью операций транспонирования ($\mu \longleftrightarrow \nu$) и комплексного сопряжения.

Стоит отметить, что из соотношения (6.6) мы сразу же получаем $\Omega^{\dagger\dagger} = \Omega$.

Для эрмитовой (самосопряженной) матрицы Ω , когда по определению $\Omega = \Omega^\dagger$, мы согласно (6.6) имеем

$$\Omega_{\mu\nu} = \Omega_{\nu\mu}^*. \quad (6.7)$$

Диагональные матричные элементы $\mu = \nu$ действительны. Последнее утверждение справедливо для любого ортонормированного набора функций (т. е. при любом выборе координатной системы в гильбертовом пространстве). В частности, это справедливо и для такого набора $\{u_\nu\}$, с помощью которого матрица $\Omega_{\mu\nu}$ приводится к диагональному виду:

$$\Omega_{\mu\nu} = \omega_\mu \delta_{\mu\nu}. \quad (6.8)$$

Так как выше ω_μ суть собственные значения матрицы Ω , то отсюда следует, что собственные значения эрмитовой матрицы действительны.

Замечание. Именно в силу этого последнего результата операторы всех физических величин (наблюдаемые) эрмитовы.

Задача 7. Построение эрмитова оператора

Найти квантовомеханический оператор, сопоставляемый классическому произведению $x p_x$.

Решение

а. Так как операторы x и p_x некоммутативны и удовлетворяют перестановочному соотношению

$$p_x x - x p_x = \frac{\hbar}{i}, \quad (7.1)$$

которое легко проверяется в координатном представлении, где

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (7.2)$$

то следует ожидать, что классическому произведению $x p_x$ будет соответствовать каждый оператор вида

$$\Omega = (1 - \alpha) x p_x + \alpha p_x x. \quad (7.3)$$

Предположим сначала, что постоянная α действительна. Эту постоянную мы должны подобрать таким образом, чтобы для всякого квантового состояния ψ среднее значение Ω было действительным:

$$\langle \Omega \rangle = \int \psi^* \Omega \psi d^3x = \text{Действительная величина}. \quad (7.4)$$

Пользуясь выражением (7.2) для оператора p_x , перепишем равенство (7.4) в развернутом виде

$$\langle \Omega \rangle = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \left[(1 - \alpha) x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \frac{\partial}{\partial x} (x \psi) \right] d^3x = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha \psi \right) d^3x.$$

Отделяя теперь действительную часть ψ от мнимой:

$$\psi = f + ig,$$

получаем

$$\begin{aligned} \langle \Omega \rangle = \frac{\hbar}{i} \int & \left[x \left(f \frac{\partial f}{\partial x} + g \frac{\partial g}{\partial x} \right) + \alpha (f^2 + g^2) \right] d^3x + \\ & + \hbar \int x \left(f \frac{\partial g}{\partial x} - g \frac{\partial f}{\partial x} \right) d^3x. \end{aligned}$$

Второй интеграл в правой части этого равенства действителен. Что же касается первого интеграла, то он чисто мнимый и в силу (7.4) должен исчезнуть. Так как, кроме того,

$$\int (f^2 + g^2) d^3x = 1,$$

то это условие можно записать в виде равенства

$$\frac{1}{2} \int x \frac{\partial}{\partial x} (f^2 + g^2) d^3x = -\alpha,$$

которое после интегрирования по частям дает

$$\alpha = \frac{1}{2}. \quad (7.5)$$

Таким образом, правильной является симметричная комбинация

$$\Omega = \frac{1}{2}(xp_x + p_x x), \quad (7.6)$$

обеспечивающая эрмитовость оператора Ω .

Если перейти к комплексным α , то годным будет любое α вида

$$\alpha = \frac{1}{2} + i\beta, \quad (7.7)$$

где β —произвольное действительное число. В самом деле, в этом случае

$$\Omega = \frac{1}{2}(xp_x + p_x x) + i\beta(p_x x - xp_x), \quad (7.8)$$

и мы только что показали, что среднее значение первого слагаемого действительно, второе же слагаемое благодаря перестановочному соотношению (7.1) дает при усреднении постоянный вклад $\beta\hbar$ независимо от выбора квантового состояния. Следовательно, это слагаемое не имеет физического смысла и его можно опустить.

б. Условие эрмитовости оператора с равным успехом можно определить соотношением

$$\langle u | \Omega v \rangle = \langle \Omega u | v \rangle \quad (7.9a)$$

или подробнее

$$\int u^* \Omega v d^3x = \int (\Omega u)^* v d^3x. \quad (7.9b)$$

Здесь u и v —произвольные комплексные функции, выбор которых ограничивается лишь требованием существования интегралов. Для оператора (7.3) при действительном α это дает

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar}{i} \int u^* \left[(1-\alpha) x \frac{\partial v}{\partial x} + \alpha \frac{\partial (xv)}{\partial x} \right] d^3x = \\ & = -\frac{\hbar}{i} \int \left[(1-\alpha) x \frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha \frac{\partial (xu^*)}{\partial x} \right] v d^3x, \end{aligned}$$

или

$$\int u^* \left(x \frac{\partial v}{\partial x} + \alpha v \right) d^3x = - \int \left(x \frac{\partial u^*}{\partial x} + \alpha u^* \right) v d^3x.$$

Изменяя здесь порядок слагаемых, получаем

$$\int x \frac{\partial}{\partial x} (u^* v) d^3x = -2\alpha \int u^* v d^3x.$$

Взяв теперь интеграл, стоящий слева, по частям, находим

$$- \int u^* v d^3x = -2\alpha \int u^* v d^3x.$$

Это, разумеется, дает наш старый результат (7.5), т. е. $\alpha = 1/2$.

Задача 8. Дифференцирование оператора

Пусть $f(p, x)$ — целая функция операторов p_k, x_k . Показать, что из коммутационных правил следуют соотношения

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = -[f, p_k], \quad (8.1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial p_k} = [f, x_k], \quad (8.2)$$

где в целях сокращения введено обозначение

$$[f, g] = \frac{i}{\hbar}(fg - gf).$$

Решение. Канонические коммутационные правила задаются формулами

$$[p_k, p_l] = 0, \quad [x_k, x_l] = 0, \quad [p_k, x_l] = \delta_{kl}. \quad (8.3)$$

Доказательство справедливости соотношений (8.1) и (8.2) распадается на четыре последовательные стадии.

1. Пусть $f = p_l$, тогда $\partial f / \partial x_k = 0$ и $\partial f / \partial p_k = \delta_{kl}$. Следовательно, соотношения (8.1) и (8.2) принимают вид

$$[p_k, p_l] = 0, \quad [p_l, x_k] = \delta_{lk}$$

и, таким образом, согласуются с формулами (8.3). Аналогично устанавливается их справедливость и в случае, когда $f = x_l$, $\partial f / \partial x_k = \delta_{kl}$, $\partial f / \partial p_k = 0$.

2. Пусть соотношения (8.1) и (8.2) справедливы для функций f и g , но тогда в силу линейности они будут справедливы и для всякой линейной комбинации $c_1 f + c_2 g$ с произвольными комплексными числами c_1 и c_2 .

3. Будучи справедливыми для функций f и g , эти соотношения справедливы и для их произведения fg . В случае (8.1) это легко проверить непосредственными вычислениями

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_k}(fg) &= f \frac{\partial g}{\partial x_k} + \frac{\partial f}{\partial x_k} g = -\{f[g, p_k] + [f, p_k]g\} = \\ &= -\frac{i}{\hbar}\{fgp_k - fp_kg + fp_kg - p_kfg\} = -[fg, p_k]. \end{aligned}$$

Аналогичные выкладки нетрудно провести и в случае соотношения (8.2).

4. Из предыдущего следует, что рассматриваемые соотношения справедливы для произвольной линейной комбинации произведений, содержащих любое число сомножителей p_k и x_k . Но тем самым они справедливы для любой целой функции переменных p_k и x_k , что и требовалось доказать.

Задача 9. Изменение средних значений со временем

Пусть $\langle A \rangle$ — среднее значение не зависящего явно от времени оператора A в состоянии ψ , которое меняется с течением времени. Выясните, как меняется $\langle A \rangle$ со временем. Что вы можете сказать об изменении средних значений $\langle x_k \rangle$ и $\langle p_k \rangle$?

Решение. Скорость изменения среднего значения

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int \psi^*(t) A \psi(t) dt \quad (9.1)$$

равна

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \int (\dot{\psi}^* A \psi + \psi^* A \dot{\psi}) dt. \quad (9.2)$$

Производные волновых функций ψ и ψ^* по времени подчиняются уравнениям Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = H \psi, \quad \frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^* = H^\dagger \psi^*, \quad (9.3)$$

где гамильтониан H эрмитов, так что $H = H^\dagger$. Подставляя (9.3) в равенство (9.2), получаем

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \int [(H^\dagger \psi^*) A \psi - \psi^* A H \psi] dt$$

или в обозначениях функционального анализа

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} [\langle H \psi | A \psi \rangle - \langle \psi | A H \psi \rangle]. \quad (9.4)$$

Преобразовав первое слагаемое в (9.4) с помощью тождества [см. (6.16)]

$$\langle \Omega \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | \Omega^\dagger \varphi \rangle,$$

имеем

$$\langle H \psi | A \psi \rangle = \langle \psi | H^\dagger A \psi \rangle = \langle \psi | H A \psi \rangle,$$

поэтому равенство (9.4) принимает вид

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | H A - A H | \psi \rangle, \quad (9.5)$$

или короче

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [H, A] \rangle. \quad (9.6)$$

Применим соотношение (9.6) в частных случаях $A = x_k$ и $A = p_k$. С учетом соотношений (8.1) и (8.2) это дает

$$\frac{d}{dt} \langle x_k \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p_k} \right\rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle p_k \rangle = - \left\langle \frac{\partial H}{\partial x_k} \right\rangle. \quad (9.7)$$

Таким образом, средние значения подчиняются каноническим уравнениям классической механики¹⁾.

¹⁾ Во избежание недоразумений следует отметить, что в общем случае

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \langle [H, A] \rangle.$$

Задача 10. Картина Шредингера и картина Гейзенберга

Когда при выборе системы координат в гильбертовом пространстве мы пользуемся так называемой *картиной Шредингера*, операторы p_k и q_k не зависят от времени, а вектор состояния ψ меняется с течением времени согласно уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = H\psi, \quad (10.1)$$

где $H(p_k, q_k)$ — гамильтониан рассматриваемой системы. Пусть гамильтониан H не зависит явно от времени. Покажите, что переход к „вращающейся“ в гильбертовом пространстве системе координат, в которой вектор состояния ψ остается неподвижным (*картина Гейзенберга*), осуществляется с помощью унитарного преобразования $U(t)$ и что в этой системе операторы p_k и q_k меняются с течением времени согласно каноническим уравнениям

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}. \quad (10.2)$$

Решение. Будем писать у всех не зависящих от времени операторов индекс 0 сверху. Пусть далее в момент времени $t=0$ обе системы координат, „неподвижная“ и „вращающаяся“, совпадают, тогда любой гейзенберговский оператор $\Omega(t)$ при $t=0$ будет совпадать с соответствующим шредингеровским оператором $\Omega(0) = \Omega^0$.

Шредингеровский и гейзенберговский векторы состояний $\psi(t)$ и ψ^0 связаны между собой соотношением

$$\psi(t) = U(t)\psi^0. \quad (10.3)$$

Следует заметить, что на выбор начального состояния $\psi(0) = \psi^0$, если не считать условия нормировки, не налагается никаких ограничений. В силу условий нормировки

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad \text{и} \quad \langle \psi^0 | \psi^0 \rangle = 1, \quad (10.4)$$

оператор U должен быть унитарным, т. е. должно выполняться соотношение

$$U^\dagger U = 1. \quad (10.5)$$

Действительно, легко видеть, что

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle U\psi^0 | U\psi^0 \rangle = \langle \psi^0 | U^\dagger U | \psi^0 \rangle,$$

но последнее выражение совпадает с $\langle \psi^0 | \psi^0 \rangle$ в том и только в том случае, когда выполняется соотношение (10.5).

Оператор U можно получить, подставляя (10.3) в уравнение (10.1):

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{U} = H^0 U, \quad (10.6)$$

где теперь мы предусмотрительно написали H^0 вместо H , поскольку в картине Шредингера в уравнении (10.1) используется оператор, не зависящий от времени. Дифференциальное уравнение (10.6) с начальным условием $U(0) = 1$ имеет решение

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H^0 t}, \quad (10.7)$$

где под экспонентой следует понимать соответствующий ей степенной ряд.

Среднее значение любого оператора в любом состоянии ψ должно быть одним и тем же, пользуемся ли мы картиной Шредингера или же картиной Гейзенберга:

$$\langle \psi(t) | \Omega^0 | \psi(t) \rangle = \langle \psi^0 | \Omega(t) | \psi^0 \rangle. \quad (10.8)$$

Так как

$$\langle \psi | \Omega^0 | \psi \rangle = \langle U\psi^0 | \Omega^0 | U\psi^0 \rangle = \langle \psi^0 | U^\dagger \Omega^0 U | \psi^0 \rangle,$$

то равенство (10.8) будет выполняться для тех и только для тех $\Omega(t)$, которые определяются соотношением

$$\Omega(t) = U^\dagger(t) \Omega^0 U(t). \quad (10.9)$$

Нелишне отметить, что оператор H^0 , согласно (10.7), коммутирует с оператором U , так что

$$H(t) = U^\dagger H^0 U = U^\dagger U H^0 = H^0,$$

поэтому он инвариантен по отношению к рассматриваемому преобразованию. Таким образом, нет необходимости вводить различные операторы H^0 и H , что апостериори оправдывает обозначения, принятые нами в уравнении (10.1).

Чтобы удостовериться в справедливости канонических уравнений (10.2), рассмотрим производную по времени от оператора (10.9):

$$\dot{\Omega} = \dot{U}^\dagger \Omega^0 U + U^\dagger \Omega^0 \dot{U}. \quad (10.10)$$

Из уравнения, сопряженного с уравнением (10.1),

$$+ \frac{\hbar}{i} \dot{\psi}^\dagger = \psi^\dagger H \quad (10.1a)$$

(здесь учтено, что оператор H эрмитов, $H = H^\dagger$) мы по аналогии с (10.6) получаем

$$+ \frac{\hbar}{i} \dot{U}^\dagger = -U^\dagger H \quad (10.6a)$$

и, таким образом, можем избавиться от производных в равенстве (10.10):

$$\dot{\Omega} = \frac{i}{\hbar} \{HU^\dagger \Omega^0 U - U^\dagger \Omega^0 HU\} = \frac{i}{\hbar} (H\Omega - \Omega H). \quad (10.11)$$

Мы получили важное правило: производная по времени от оператора Ω , который сам не зависит явно от времени, равна его

квантовым скобкам Пуассона с гамильтонианом H :

$$\begin{aligned}\dot{\Omega} &= [H, \Omega], \\ [H, \Omega] &= \frac{i}{\hbar} (H\Omega - \Omega H).\end{aligned}\quad (10.12)$$

Правило (10.12), примененное к операторам p_k и q_k , сразу же дает

$$\dot{p}_k = [H, p_k], \quad \dot{q}_k = [H, q_k]. \quad (10.13)$$

Этим алгебраическим соотношениям можно придать иную форму, если воспользоваться полученными с помощью основных коммутационных правил формулами задачи 8:

$$[H, p_k] = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad [H, q_k] = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad (10.14)$$

что непосредственно приводит к каноническим уравнениям (10.2).

Замечание. Выше предполагалось, что в картине Шредингера операторы H и Ω не зависят от времени. Если же такая зависимость имеется, то это приводит к появлению дополнительной частной производной по времени. Кроме того, весь формализм становится значительно сложнее, так, например, оператор $U(t)$ уже не будет простой экспонентой из-за появления в ее степенном разложении операторов H , относящихся к различным моментам времени.

Задача 11. Гамильтониан, зависящий от времени

Пусть оператор H из предыдущей задачи зависит явно от времени (например, вследствие действия на систему переменного электрического поля). Требуется найти унитарный оператор $U(t)$ в этом более общем случае.

Решение. В случае гамильтониана $H(p_k, q_k; t)$ в нашем распоряжении все еще имеется уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = H(t) \psi(t). \quad (11.1)$$

Переход к картине Гейзенберга осуществляется теперь с помощью унитарного оператора $U(t)$

$$\psi(t) = U(t) \psi^0, \quad (11.2)$$

который подчиняется дифференциальному уравнению

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{U}(t) = H(t) U(t) \quad (11.3)$$

с начальным условием

$$U(0) = 1. \quad (11.4)$$

Положим для простоты

$$-\frac{i}{\hbar} H = \kappa, \quad (11.5)$$

тогда решением уравнения

$$\dot{U} = \kappa H U$$

с начальным условием (11.4) будет бесконечный ряд

$$U(t) = 1 + \kappa \int_0^t H(t') dt' + \kappa^2 \int_0^t H(t') dt' \int_0^{t'} H(t'') dt'' + \\ + \kappa^3 \int_0^t H(t') dt' \int_0^{t'} H(t'') dt'' \int_0^{t''} H(t''') dt''' + \dots \quad (11.6)$$

В этом легко удостовериться, почленно дифференцируя ряд (11.6):

$$\dot{U}(t) = \kappa H(t) + \kappa^2 H(t) \int_0^t H(t'') dt'' + \\ + \kappa^3 H(t) \int_0^t H(t'') dt'' \int_0^{t''} H(t''') dt''' + \dots = \\ = \kappa H(t) \left[1 + \kappa \int_0^t H(t'') dt'' + \kappa^2 \int_0^t H(t'') dt'' \int_0^{t''} H(t''') dt''' + \dots \right] = \\ = \kappa H(t) U(t).$$

Следует заметить, что в этих интегралах $t > t' > t'' > \dots > 0$, так что сомножители H , взятые в различные моменты времени, образуют упорядоченное во времени произведение, причем сомножители, относящиеся к более поздним моментам времени, всегда стоят перед сомножителями, относящимися к более ранним моментам времени.

Задача 12. Повторное измерение

Гамильтониан системы H не зависит от времени, а его собственные векторы $|\nu\rangle$ принадлежат невырожденным собственным значениям $\hbar\omega_\nu$:

$$H|\nu\rangle = \hbar\omega_\nu|\nu\rangle. \quad (12.1)$$

В том же самом гильбертовом пространстве состояний определен оператор A , также обладающий невырожденными собственными значениями:

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle. \quad (12.2)$$

Вначале система находится в состоянии $|\nu\rangle$, затем в этой системе производят измерение наблюдаемой A . Чему равно математическое ожидание наблюдаемой A и какова вероятность обнаружить в результате этого измерения значение наблюдаемой A , равное a_m ? Пусть в результате измерения наблюдаемой A получено значение a_m . Чему равна вероятность обнаружить это же значение a_m ,

если спустя время t произвести повторное измерение наблюдаемой A ?

Решение. В начальном состоянии математическое ожидание наблюдаемой A равно $\langle \nu | A | \nu \rangle$. Подставляя сюда разложения

$$|\nu\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \nu \rangle \quad \text{и} \quad \langle \nu | = \sum_{n'} \langle \nu | n' \rangle \langle n' |,$$

получаем

$$\langle \nu | A | \nu \rangle = \sum_{n, n'} \langle \nu | n' \rangle \langle n' | A | n \rangle \langle n | \nu \rangle.$$

Так как

$$\langle n' | A | n \rangle = a_n \delta_{nn'},$$

то последнее выражение упрощается:

$$\langle \nu | A | \nu \rangle = \sum_n a_n |\langle \nu | n \rangle|^2. \quad (12.3)$$

Поэтому вероятность обнаружить в результате первого измерения значение a_m равна

$$P_m = |\langle m | \nu \rangle|^2. \quad (12.4)$$

Сразу же после измерения система вместо исходного состояния $|\nu\rangle$ оказывается в состоянии $|m\rangle$. Дальнейшая эволюция системы определяется уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle = H |t\rangle \quad (12.5)$$

и начальным условием

$$|0\rangle = |m\rangle.$$

Здесь и далее $|t\rangle$ означает вектор состояния в момент времени t . Так как гамильтониан H не зависит от времени, то

$$|t\rangle = e^{-(it/\hbar)H} |m\rangle. \quad (12.6)$$

Если воспользоваться разложением вектора $|m\rangle$ по собственным векторам гамильтониана H ,

$$|m\rangle = \sum_{\mu} |\mu\rangle \langle \mu | m \rangle,$$

и учесть, что

$$e^{-(it/\hbar)H} |\mu\rangle = e^{-i\omega_{\mu} t} |\mu\rangle,$$

то выражение (12.6) нетрудно привести к виду

$$|t\rangle = \sum_{\mu} e^{-i\omega_{\mu} t} |\mu\rangle \langle \mu | m \rangle. \quad (12.7)$$

Аргументация, которая ранее привела нас к соотношению (12.4), позволяет теперь заключить, что вероятность вновь обнаружить значение a_m при повторном измерении в момент времени t равна

$$P'_m = |\langle m | t \rangle|^2, \quad (12.8)$$

причем

$$\langle m | t \rangle = \sum_{\mu} e^{-i\omega_{\mu} t} |\langle m | \mu \rangle|^2. \quad (12.9)$$

Задача 13. Криволинейные координаты

В уравнении Шредингера для системы точечных масс сделать переход к обобщенным криволинейным координатам.

Решение. Самое главное в этой задаче — преобразовать оператор кинетической энергии

$$T = -\frac{1}{2} \hbar^2 \sum_{\mu} \frac{1}{m_{\mu}} \frac{\partial^2}{\partial x_{\mu}^2}, \quad (13.1)$$

где m_{μ} имеет одно и то же значение для каждой тройки слагаемых, соответствующих одной частице. Выражение (13.1) представляет собой квантовомеханический аналог классического выражения

$$T_{\text{кл}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} m_{\mu} \dot{x}_{\mu}^2. \quad (13.2)$$

Введем вместо координат x_{μ} координаты

$$\xi_{\mu} = \sqrt{m_{\mu}} x_{\mu}, \quad (13.3)$$

тогда

$$T_{\text{кл}} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \dot{\xi}_{\mu}^2. \quad (13.4)$$

Произведем теперь в ξ -пространстве с элементом длины

$$ds^2 = \sum_{\mu} d\xi_{\mu}^2 \quad (13.5)$$

замену координат ξ_{μ} на обобщенные координаты q^k и учитывая, что в новых координатах

$$ds^2 = \sum_i \sum_k g_{ik} dq^i dq^k, \quad (13.6)$$

получаем

$$T_{\text{кл}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_k g_{ik} \dot{q}^i \dot{q}^k. \quad (13.7)$$

Вернемся к квантовой механике. Выражение (13.1) эквивалентно выражению

$$T = -\frac{1}{2} \hbar^2 \sum_{\mu} \frac{\partial^2}{\partial \xi_{\mu}^2} = -\frac{1}{2} \hbar^2 \nabla^2. \quad (13.8)$$

Далее из дифференциальной геометрии известно, что при замене координат ξ_{μ} координатами q^i оператор Лапласа преобразуется

к виду

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_i \sum_k \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ik} \frac{\partial}{\partial q^k} \right), \quad (13.9)$$

где g — определитель метрического тензора g_{ik} , а g^{ik} — его контравариантные компоненты. Последние можно найти из соотношения

$$g^{ik} = \frac{G_{ik}}{g}, \quad (13.10)$$

в котором G_{ik} означает алгебраическое дополнение элемента g_{ik} в определителе g . Равенством (13.9) полностью исчерпывается решение нашей задачи, так как теперь оператор кинетической энергии, соответствующий классическому выражению (13.7), можно записать в виде

$$T = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_i \sum_k \frac{\partial}{\partial q^i} \left(\sqrt{g} g^{ik} \frac{\partial}{\partial q^k} \right). \quad (13.11)$$

Вычисление потенциальной энергии, разумеется, тривиально.

Замечание. Этот метод применим и к тем задачам, в которых не фигурируют прямоугольные координаты точечных масс. В этом случае он просто связывает классическое выражение (13.7) с оператором (13.11). Однако указанную связь ни в коем случае нельзя считать тривиальной (см. замечания к теории симметричного волчка в задаче 46).

Задача 14. Волновые функции в импульсном представлении

Фурье-образ $f(\mathbf{k})$ волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ характеризует распределение импульсов в квантовом состоянии ψ . Требуется вывести интегральное уравнение для $f(\mathbf{k})$ с фурье-образом потенциала в качестве ядра.

Решение. Между функциями $\psi(\mathbf{r})$ и $f(\mathbf{k})$ имеются два взаимно обратных соотношения¹⁾

$$\psi(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{k}) d^3k, \quad (14.1)$$

$$f(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) d^3x. \quad (14.2)$$

Положим далее

$$V(\mathbf{r}) = \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} W(\mathbf{k}) d^3k, \quad (14.3)$$

¹⁾ Если соотношение (14.1) использовать в качестве определения $f(\mathbf{k})$ и применить к нему операцию $\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} d^3x$, то с учетом определения 3-мерной δ -функции,

$$\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d^3x,$$

в результате, как нетрудно убедиться, получится обратное соотношение (14.2). Аналогичные соображения использованы ниже при выводе соотношения (14.8).

тогда для фурье-образа потенциала будем иметь

$$W(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3x. \quad (14.4)$$

Предполагается, что волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi = E\psi. \quad (14.5)$$

Подставляя сюда вместо ψ и V соответственно выражения (14.1) и (14.3), получаем

$$(2\pi)^{-3/2} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{k}^2 f(\mathbf{k}) d^3k + \int d^3k \int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} W(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}') d^3k' - E \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{k}) d^3k \right] = 0.$$

В двойном интеграле перейдем от интегрирования по переменной \mathbf{k} к интегрированию по переменной $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{k}'$, а затем эту новую переменную вновь обозначим посредством \mathbf{k} . Интеграл по \mathbf{k} обращается в нуль при *любом* значении \mathbf{r} лишь в том случае, когда само подынтегральное выражение равно нулю, но тогда

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E \right) f(\mathbf{k}) = - \int W(\mathbf{k} - \mathbf{k}') f(\mathbf{k}') d^3k'. \quad (14.6)$$

Это и есть искомое интегральное уравнение с фурье-образом потенциала $W(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ в качестве ядра.

Конечно, интегральное уравнение (14.6) можно получить только при условии, что фурье-образ потенциала (14.4) существует; для этого, например, потенциал $V(\mathbf{r})$ должен убывать на больших расстояниях по меньшей мере как $r^{-1-\varepsilon}$, где $\varepsilon > 0$.

Необходимо отметить, что из условия нормировки

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3x = 1 \quad (14.7)$$

следует равенство

$$\int |f(\mathbf{k})|^2 d^3k = 1. \quad (14.8)$$

Это можно показать, подставив в (14.7) выражение (14.1) для функции ψ :

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3x = (2\pi)^{-3} \int d^3x \int d^3k \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{k}) f^*(\mathbf{k}') d^3k'.$$

Если здесь сначала выполнить интегрирование по d^3x , то мы без труда получим соотношение (14.8)¹⁾.

¹⁾ См. в этой связи замечание в конце следующей задачи.

Задача 15. Пространство импульсов. Периодические и непериодические волновые функции

Рассмотрите вопрос о вероятностной интерпретации волновой функции в импульсном пространстве. Начните с периодической волновой функции $\psi(\mathbf{r})$ в конфигурационном пространстве и исследуйте предельный переход к кубу периодичности с бесконечно большим ребром.

Решение. Обозначим через L длину периодичности в каждом из направлений x, y, z конфигурационного пространства. Тогда ряд Фурье

$$\psi(\mathbf{r}, t) = L^{-3/2} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}(t) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad \omega = \frac{\hbar}{2m} k^2, \quad (15.1)$$

будет содержать лишь такие члены, для которых компоненты каждого из векторов \mathbf{k} определяются соотношением

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (15.2)$$

Это означает, что в \mathbf{k} -пространстве при больших значениях L в элементе объема d^3k содержится

$$d^3k \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \quad (15.3)$$

различных векторов \mathbf{k} .

Вопрос о нормировке ряда (15.1) можно решить с помощью подходящего выбора коэффициентов $c_{\mathbf{k}}$. Запишем интеграл от квадрата модуля волновой функции по объему куба периодичности:

$$\int_{(L^3)} |\psi|^2 d^3x = L^{-3} \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} c_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}'} e^{i(\omega - \omega') t} \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d^3x.$$

Интеграл в правой части этого равенства обращается в нуль, если $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$, и равен L^3 , если $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, поэтому

$$\int_{(L^3)} |\psi|^2 d^3x = \sum_{\mathbf{k}} |c_{\mathbf{k}}|^2. \quad (15.4)$$

Пусть теперь P_L есть вероятность обнаружить частицу внутри куба периодичности L^3 , тогда $|c_{\mathbf{k}}|^2 P_L$ будет вероятностью обнаружить частицу в кубе периодичности с импульсом $\hbar \mathbf{k}$, а $|c_{\mathbf{k}}|^2$ — вероятностью обнаружить у частицы импульс $\hbar \mathbf{k}$ при условии, что она находится внутри куба периодичности L^3 .

Переходя к пределу бесконечно больших L , можно заменить ряд Фурье (15.1) интегралом Фурье по \mathbf{k} -пространству. Согласно (15.2) и (15.3), это можно сделать с помощью правила:

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 d^3k. \quad (15.5)$$

Тогда равенство (15.1) даст

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{L^{3/2}}{(2\pi)^3} \int c(\mathbf{k}, t) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3k. \quad (15.6)$$

Данный интеграл Фурье представляет ограниченную волновую функцию с не зависящими от L значениями в том и только в том случае, если величина

$$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^{3/2} c(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}) \quad (15.7)$$

имеет конечный предел при $L \rightarrow \infty$. Тогда волновую функцию

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int f(\mathbf{k}, t) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} d^3k \quad (15.8)$$

можно нормировать следующим образом:

$$\int |\psi|^2 d^3x = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \int f^*(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}') e^{i(\omega - \omega')t} d^3k' \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} d^3x, \quad (15.9)$$

где последний интеграл берется по всему пространству,

$$\int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} d^3x = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}). \quad (15.10)$$

Поэтому для интеграла (15.9) получаем

$$\int |\psi|^2 d^3x = \int |f(\mathbf{k}, t)|^2 d^3k, \quad (15.11)$$

что, кстати говоря, есть просто преобразование суммы (15.4) в интеграл с помощью правила (15.5) и с учетом соотношения (15.7). Полученный результат означает, что вероятность обнаружить у частицы импульс в пределах элемента d^3k безотносительно к ее местоположению в конфигурационном пространстве равна

$$dP_{\mathbf{k}} = d^3k |f(\mathbf{k}, t)|^2. \quad (15.12)$$

Замечание. При изменении порядка интегрирования необходимо соблюдать известную осторожность, если $f(\mathbf{k})$ не является непрерывной функцией \mathbf{k} . Пусть, например,

$$f(\mathbf{k}) = (2\pi)^{3/2} \delta(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}), \quad (15.13)$$

тогда в соответствии с равенством (15.8) имеем

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r} - \omega_0 t)}. \quad (15.14)$$

Интеграл (15.11) и интегралы (15.9) с измененным порядком интегрирования содержали бы в этом случае квадрат δ -функции и были бы совершенно бессмысленными. Если же выполнить интегрирование по конфигурационному пространству в конце, то равенство (15.9) дает

$$\int |\psi|^2 d^3x = \int d^3x,$$

что находится в согласии с выражением для волновой функции (15.14).

II. Одночастичные задачи без учета спина

A. Одномерные задачи

Одномерные задачи, будучи в известном смысле чрезмерной идеализацией, тем не менее могут быть использованы для выяснения основных особенностей квантовой механики. Эти задачи возникают при рассмотрении трехмерного волнового уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(x, t) \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (\text{A.1})$$

в котором потенциал зависит от одной-единственной декартовой координаты x . С помощью факторизации

$$\psi = e^{i(k_1 y + k_2 z)} \varphi(x, t) \quad (\text{A.2})$$

получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_2^2 + k_3^2) \varphi + V(x, t) \varphi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial t}.$$

Последнее уравнение можно еще более упростить, положив

$$\varphi(x, t) = e^{-i\omega_0 t} u(x, t), \quad \hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_2^2 + k_3^2). \quad (\text{A.3})$$

В результате мы приходим к одномерному волновому уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + V(x, t) u = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial u}{\partial t}. \quad (\text{A.4})$$

Экспоненциальные множители в формулах (A.2) и (A.3) описывают распространяющиеся перпендикулярно оси x плоские волны, которые не влияют на поведение волновой функции в направлении оси x .

Задача 16. Фундаментальные решения в случае свободного движения

Решить одномерное волновое уравнение в случае $V=0$. Обсудить физический смысл полученных решений.

Решение. Волновое уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{16.1})^{1)}$$

¹⁾ Здесь и далее будем обозначать через ψ одномерную волновую функцию, удовлетворяющую уравнению (A.4), а через u — ее пространственную часть.

допускает разделение переменных:

$$\psi(x, t) = u(x)g(t), \quad (16.2)$$

так как при подстановке выражения (16.2) в уравнение (16.1) получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{u''}{u} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\dot{g}}{g} = \hbar\omega, \quad (16.3)$$

где через $\hbar\omega$ обозначена постоянная разделения. Разбивая (16.3) на два отдельных уравнения, находим

$$\dot{g} = -i\omega g, \quad \text{т. е. } g(t) = e^{-i\omega t}, \quad (16.4)$$

и

$$u'' + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0. \quad (16.5)$$

Если ω — действительная величина, то волновая функция будет периодической и $|\psi|^2$ не будет зависеть от времени (*стационарное состояние*). Если ω — положительная величина, то

$$\frac{2m\omega}{\hbar} = k^2 \quad (16.6)$$

также положительная величина, поэтому решение (16.5) будет, кроме того, периодической функцией пространственной переменной x .

Комплексная форма (16.4) зависимости волновой функции от времени составляет примечательную особенность квантовой механики: действительные функции $\sin \omega t$ и $\cos \omega t$ не являются решениями дифференциального уравнения (16.4). Это столь разительное отличие от классической физики обусловлено тем, что уравнение Шредингера является уравнением *первого* порядка по времени.

Физический смысл параметра ω можно выяснить, рассматривая оператор в левой части уравнения (16.1) в качестве оператора Гамильтона, который в данном случае состоит из одного оператора кинетической энергии. Отсюда следует, что величина $E = \hbar\omega$ представляет собой кинетическую энергию частицы и, таким образом, должна быть положительна, а наше решение есть собственная функция гамильтониана.

Так как \hbar^2 — положительная постоянная, общее решение уравнения (16.5) или уравнения

$$u'' + k^2 u = 0 \quad (16.7)$$

имеет вид

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (16.8a)$$

поэтому одномерная волновая функция

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)} \quad (16.8b)$$

состоит из двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях. У обеих волн фазовая скорость равна $v_\phi = \omega/k$.

Физический смысл пространственной части волновой функции (16.8а) станет ясен, если записать в явном виде выражения для плотности

$$\rho = \psi^* \psi \quad (16.9)$$

и для потока

$$s = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right). \quad (16.10)$$

Согласно (16.8б), мы имеем

$$\begin{aligned} \rho &= |A|^2 + |B|^2 + (AB^* e^{2ikx} + A^* B e^{-2ikx}), \\ s &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2). \end{aligned}$$

Две волны с амплитудами A и B соответствуют, как видно, двум противоположно направленным потокам, интенсивность которых определяется относительными нормировочными постоянными волн и пропорциональна k . Выражение для плотности указывает на наличие интерференции двух (когерентных) волн, обуславливающей пространственную периодичность.

Когда нет особых причин (например, граничных условий) добиваться когерентности, разумно рассматривать каждую волну отдельно, полагая либо $B=0$, что дает $s > 0$, либо $A=0$, что дает $s < 0$. В результате получается прямолинейное движение частицы либо в том, либо в другом направлении. Считая, что величина k может быть обоих знаков, можно резюмировать наши результаты следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= C e^{i(kx - \omega t)}, \\ E &= \hbar \omega, \quad k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar}, \\ \rho &= |C|^2, \quad s = \frac{\hbar k}{m} |C|^2. \end{aligned} \quad (16.11)$$

Исключая ω , находим

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (16.12)$$

поэтому импульс частицы и ее классическая скорость соответственно равны

$$p = \hbar k \quad (16.13)$$

и

$$v = \frac{\hbar k}{m}. \quad (16.14)$$

Последняя совпадает отнюдь не с фазовой

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} v,$$

а с групповой скоростью волны

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v.$$

Замечание. Основное дифференциальное уравнение (16.1) можно рассматривать как *уравнение диффузии* с мнимым коэффициентом диффузии D :

$$D \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad D = i \frac{\hbar}{2m}.$$

Так как разделение переменных играет важную роль в квантовой теории, а не в теории диффузии, то решения, типичные для задач диффузии (с действительным коэффициентом D),

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp \left[\frac{im}{2\hbar} \cdot \frac{(x-\xi)^2}{t} \right] d\xi,$$

не находят применения в квантовом случае.

Обращение времени в уравнении (16.1) ведет к замене ψ на ψ^* .

Задача 17. Волновой пакет в случае свободного движения

Построить волновой пакет и исследовать его временную эволюцию.

Решение. Мы начнем с частного решения волнового уравнения, записав его в ранее найденном виде (16.11):

$$\psi(k; x, t) = C(k) e^{i(kx - \omega t)}, \quad (17.1)$$

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2, \quad (17.2)$$

а $C(k)$ — произвольная постоянная амплитуда. Здесь k — все еще свободный параметр, так что общее решение волнового уравнения записывается в виде любого сходящегося интеграла по k от выражения (17.1):

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(k; x, t) dk. \quad (17.3)$$

Равенство (17.3) описывает одномерный волновой пакет наиболее общего вида. Чтобы интеграл сходился, амплитуда $C(k)$ должна стремиться к нулю при $|k| \rightarrow \infty$, по крайней мере как $1/k$. Всякая выбранная подходящим образом амплитуда $C(k)$ приводит к решению определенного вида.

Теперь построим волновой пакет таким образом, чтобы в начальный момент времени $t=0$ вероятность обнаружить описываемую им частицу заметно отличалась от нуля лишь внутри малой окрестности точки $x=0$ и чтобы частица двигалась с импульсом

$p_0 = \hbar k_0$. Этого можно добиться, положив

$$\psi(x, 0) = A \exp \left[-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x \right]. \quad (17.4)$$

Действительно, в этом случае плотность

$$\rho(x, 0) = |\psi(x, 0)|^2 = |A|^2 \exp \left(-\frac{x^2}{a^2} \right)$$

отвечает частице, локализованной в области $|x| \leq a$, а поток (16.10) равен

$$s(x, 0) = \frac{\hbar}{2mi} 2ik_0 |A|^2 \exp \left(-\frac{x^2}{a^2} \right) = \rho \frac{\hbar}{m} k_0,$$

поэтому величина $v_0 = \hbar k_0/m$ есть скорость частицы, а $p_0 = mv_0 = \hbar k_0$ — импульс пакета. Так как волновая функция описывает одну частицу, то имеет место условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx = 1,$$

т. е.

$$|A|^2 = \frac{1}{a \sqrt{\pi}}. \quad (17.5)$$

Выражение (17.4) можно разложить по плоским волнам, используя соотношения (17.3) и (17.1):

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{ikx} dk. \quad (17.6)$$

Но этот интеграл есть интеграл Фурье, обращая который, получаем

$$C(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx = \frac{A}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x \right] dx.$$

Вычисляя последний интеграл с помощью хорошо известной формулы

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}, \quad (17.7)$$

окончательно находим

$$C(k) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} (k - k_0)^2 \right]. \quad (17.8)$$

Этот результат легко понять, привлекая на помощь соотношение неопределенности Гейзенберга. В начальном состоянии неопределенность координаты частицы, согласно выражению (17.4), имеет порядок $\Delta x \approx a$. С другой стороны, как показывает выражение (17.8), основной вклад в волновую функцию дает та часть спектра

волновых чисел k (или импульсов $p = \hbar k$), которая лежит в полосе шириной $\Delta k \approx 1/a$ (или $\Delta p \approx \hbar/a$) вблизи $k = k_0$. Следовательно, независимо от выбора величины a имеет место соотношение

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar. \quad (17.9)$$

но это и есть соотношение неопределенности Гейзенберга.

Определив амплитуду $C(k)$ по начальному состоянию при $t = 0$, мы можем теперь перейти к вычислению общего интеграла (17.3) для *любого* момента времени:

$$\psi(x, t) = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2} a^2 (k - k_0)^2 + ikx - i \frac{\hbar t}{2m} k^2 \right] dk.$$

Здесь в экспоненте стоит квадратичная форма k , так что этот интеграл снова можно привести к интегралу ошибок (17.7). Результат имеет вид

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\left(1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}\right)^{1/2}} \exp \left[-\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + i \frac{\hbar t}{2m} k_0^2 a^2}{2a^2 \left(1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}\right)} \right]. \quad (17.10)$$

В этом довольно сложном выражении нетрудно разобраться, снова рассмотрев плотность ρ и поток s , но теперь уже для *любого* момента времени t . Плотность в этом случае равна

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{1/2}} \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]} \right]. \quad (17.11)$$

Как функция координаты x она все еще имеет форму колоколообразной кривой, однако максимум ее теперь сдвинут из точки $x = 0$ в точку $x = (\hbar k_0/m) t$. Следовательно, максимум „дуга волн“, описываемого выражением (17.10), перемещается со скоростью $v_0 = \hbar k_0/m$ (групповая скорость равна скорости частицы). В то же самое время знаменатель в экспоненте (17.11) показывает, что ширина волнового пакета увеличилась от значения a при $t = 0$ до значения

$$a' = a \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]^{1/2} \approx \frac{\hbar}{ma} t$$

при $t = t$. Этот эффект легко объяснить, исходя из вида спектральной функции (17.8). Так как спектр волновых чисел имеет ширину $\Delta k \approx 1/a$, то скорости отдельных волн разбросаны в области шириной $\Delta v = (\hbar/m) \Delta k = \hbar/ma$, поэтому пакет расплывется на величину $\Delta x = t \Delta v = (\hbar/ma) t$, что и было найдено выше.

Выражение для потока получается из (17.10) с помощью соотношения

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = ik_0 \frac{1 + i \frac{x}{a^2 k_0}}{1 + i \frac{\hbar t}{ma^2}} \psi.$$

Непосредственное вычисление после сравнения с формулой (17.11) дает

$$s(x, t) = \rho(x, t) v_0 \frac{1 + \frac{\hbar t x}{ma^2 k_0}}{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}. \quad (17.12)$$

Отсюда видно, что для произвольных времен мы отнюдь не имеем $s = \rho v_0$, как это было при $t = 0$, что опять-таки является следствием конечной ширины спектра скоростей. Для максимума пакета $x_0 = v_0 t$, и равенство (17.12) приводит к элементарному соотношению $s = \rho v_0$. С другой стороны, для $x \leq x_0$ мы имеем $s \leq \rho v_0$, и это вполне разумно, так как к моменту времени t до точки $x < x_0$ ($x > x_0$) доходят лишь те части волнового пакета, скорость которых меньше (больше) v_0 .

В заключение следует упомянуть, что условие нормировки $\int \rho dx = 1$ выполняется для всех времен, это является выражением закона сохранения вещества.

Задача 18. Стоячие волны

Частица заключена между двумя непроницаемыми стенками, расположенными в точках $x = -a$ и $x = +a$. (Стенки служат идеализацией сильного отталкивания, испытываемого частицей при приближении к указанным границам.) Найти собственные состояния и обсудить их свойства.

Решение. Для стационарных состояний мы имеем

$$\psi(x, t) = u(x) e^{-t \frac{E}{\hbar}}. \quad (18.1)$$

Пространственная часть волновой функции $u(x)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$u'' + k^2 u = 0, \quad (18.2)$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (18.3)$$

и в самом общем случае имеет вид

$$u(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}. \quad (18.4)$$

Наличие непроницаемых стенок налагает граничные условия

$$u(a) = 0, \quad u(-a) = 0, \quad (18.5)$$

что в сочетании с условием нормировки,

$$\int_{-a}^a |u(x)|^2 dx = 1, \quad (18.6)$$

если отвлечься от фазового множителя, выбор которого никогда не регламентируется в квантовой механике, позволяет полностью определить собственные функции.

Подставляя выражение (18.4) в соотношения (18.5), получаем для определения A и B систему двух линейных однородных уравнений:

$$\begin{aligned} Ae^{ika} + Be^{-ika} &= 0, \\ Ae^{-ika} + Be^{ika} &= 0. \end{aligned}$$

Эта система допускает нетривиальное решение только в том случае, если ее определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} e^{ika}e^{-ika} \\ e^{-ika}e^{ika} \end{vmatrix} = 0, \quad \text{или } \sin 2ka = 0. \quad (18.7)$$

Условию (18.7) удовлетворяют лишь *собственные значения* k_n , определяемые формулой

$$k_n = \frac{\pi}{2a} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (18.8)$$

Значение $k = 0$, также удовлетворяющее условию (18.7), должно быть исключено как противоречащее условию нормировки (18.6). Из соотношений (18.3) и (18.8) для собственных значений энергии получаем

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2. \quad (18.9)$$

На основании (18.8) имеем

$$e^{ik_n a} = e^{i \frac{\pi}{2} n} = i^n,$$

поэтому

$$B = (-1)^{n+1} A.$$

Если n — нечетное целое число, то $B = A$, а нормированные волновые функции равны

$$u_n^+(x) = a^{-\frac{1}{2}} \cos k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots \quad (18.10a)$$

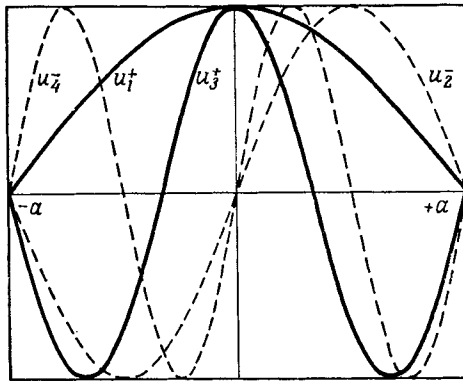
Если же n — четное целое число, то $B = -A$, и мы имеем

$$u_n^-(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin k_n x = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots \quad (18.10b)$$

Так как функции u_n , если отвлечься от несущественного изменения знака в формуле (18.10б), не зависят от знака n , то отрицательные значения n можно не принимать во внимание, поэтому, например, волновые функции четырех наименее состояний будут равны

$$\begin{aligned}
 n=1, \quad E_1 &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}, \quad u_1^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi x}{2a}, \\
 n=2, \quad E_2 &= 4E_1, \quad u_2^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi x}{a}, \\
 n=3, \quad E_3 &= 9E_1, \quad u_3^+ = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{3\pi x}{2a}, \\
 n=4, \quad E_4 &= 16E_1, \quad u_4^- = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{2\pi x}{a}.
 \end{aligned} \tag{18.11}$$

Следует отметить, что собственные функции попеременно то четные (n нечетное), то нечетные (n четное) по отношению к инвер-



Фиг. 1. Первые четыре собственные функции в одномерном потенциальном ящике с бесконечными стенками.

сии с центром в начале координат. Об этом свойстве волновых функций говорят как о *четности* состояния: в случае симметричной функции мы говорим, что четность положительна, в противном же случае — отрицательна. В принятых обозначениях (u_n^+ , u_n^-) четность состояния отмечается верхними индексами „+“ и „-“.

Первые четыре собственные функции изображены на фиг. 1. Так как пространственные части собственных функций действительны, то результирующий ток вероятности не может существовать ни в одном состоянии. Это является следствием того, что в формуле (18.4) (вспомните рассуждения, приведенные в задаче 16) $|A| = |B|$. Волны с амплитудами A и B в выражении (18.4) дают противоположные вклады в токи и импульсы.

Следовательно, собственные функции гамильтониана, принадлежащие дискретным собственным значениям энергии, не являются собственными функциями оператора импульса

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}.$$

Действительно, дифференцирование функций (18.10а) и (18.10б) ведет не к воспроизведению, а к замене синусоидальных решений косинусоидальными. Среднее же значение импульса можно вычислить по формуле

$$\langle n | p | n \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-a}^a u_n(x) \frac{\partial}{\partial x} u_n(x) dx.$$

Для всех состояний этот интеграл исчезает, так как подынтегральное выражение является нечетной функцией x . Таким образом, $\langle n | p | n \rangle = 0$ в согласии с обращением в нуль плотности тока вероятности.

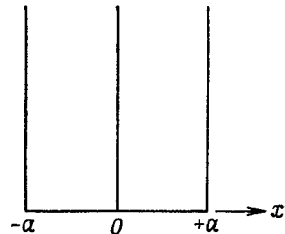
Замечание. В математическом отношении это по существу та же самая задача, что и классическая задача о колебаниях струны. Единственное различие заключается в том, что здесь квадратичному закону (18.9) следуют собственные значения энергии, там же ему подчиняются собственные частоты. Классическая энергия колебаний не имеет, однако, никакого аналога в квантовом случае, поскольку она зависит от амплитуды колебаний — последняя же может быть произвольной, в то время как амплитуда волновой функции фиксирована условием нормировки (18.6), т. е. тем обстоятельством, что число частиц равно единице.

Задача 19. Полупроницаемая перегородка

Дополнительно к условиям предыдущей задачи в точке $x=0$ вводится бесконечно узкая и бесконечно высокая полупроницаемая перегородка. Выяснить влияние перегородки на стационарные состояния.

Решение. Полупроницаемую перегородку (фиг. 2), разделяющую всю область на две равные части, можно получить как предельный случай барьера конечной ширины 2ϵ (между точками $x = -\epsilon$ и $x = +\epsilon$) и конечной высоты V_0 . Для краткости введем обозначения

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = \chi^2. \quad (19.1)$$



Фиг. 2. Потенциальный ящик с полупроницаемой перегородкой.

Кроме двух граничных условий $u(\pm a) = 0$, благодаря наличию барьера мы имеем еще четыре граничных условия, так как функции $u(x)$ и $u'(x)$ должны быть непрерывны в точках $x = \pm\epsilon$. Удовлетворяя первым двум условиям и беря решение в дейст-

вительной форме, имеем

$$u = \begin{cases} A_1 \sin k(x+a), & -a \leq x \leq -\varepsilon, \\ Be^{-\kappa x} + Ce^{\kappa x}, & -\varepsilon \leq x \leq \varepsilon, \\ A_2 \sin k(x-a), & \varepsilon \leq x \leq a. \end{cases} \quad (19.2)$$

Требование непрерывности при $x = \pm \varepsilon$ теперь дает

$$u(-\varepsilon) = A_1 \sin k(a-\varepsilon) = Be^{\kappa \varepsilon} + Ce^{-\kappa \varepsilon}, \quad (19.3a)$$

$$u'(-\varepsilon) = kA_1 \cos k(a-\varepsilon) = \kappa(-Be^{\kappa \varepsilon} + Ce^{-\kappa \varepsilon}), \quad (19.3б)$$

$$u(+\varepsilon) = A_2 \sin k(\varepsilon-a) = Be^{-\kappa \varepsilon} + Ce^{\kappa \varepsilon}, \quad (19.3в)$$

$$u'(+\varepsilon) = kA_2 \cos k(\varepsilon-a) = \kappa(-Be^{-\kappa \varepsilon} + Ce^{\kappa \varepsilon}). \quad (19.3г)$$

После исключения A_1 и A_2 из равенств (19.3a), (19.3б) и (19.3в), (19.3г) соответственно остаются два соотношения

$$k \operatorname{ctg} k(a-\varepsilon) = \kappa \frac{-Be^{2\kappa \varepsilon} + C}{Be^{2\kappa \varepsilon} + C}, \quad (19.4)$$

$$k \operatorname{ctg} k(a-\varepsilon) = \kappa \frac{B - Ce^{2\kappa \varepsilon}}{B + Ce^{2\kappa \varepsilon}}.$$

Из тождественности их левых частей следует равенство правых частей. Последние же равны в том и только в том случае, если $B = \pm C$. При $B = +C$ из равенств (19.3a) и (19.3в) следует, что $A_1 = -A_2$, и мы получаем решения с положительной четностью, если же $B = -C$, то $A_1 = A_2$, и мы получаем решения с отрицательной четностью. Следовательно, как и в предыдущей задаче, стационарные состояния разделяются на два класса, характеризующиеся различными четностями.

Теперь перейдем к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$, $\kappa \rightarrow \infty$ так, чтобы $\kappa \varepsilon \rightarrow 0$, но величина

$$\kappa^2 \varepsilon = \Omega \quad (19.5)$$

оставалась конечной. Величину Ω будем называть *коэффициентом непроницаемости* перегородки, так как с ростом Ω она становится все более непроницаемой. При положительной четности ($B = C$) соотношение (19.4) после разложения его правой части в ряд дает

$$k \operatorname{ctg} ka = -\Omega. \quad (19.6a)$$

При отрицательной четности ($B = -C$) аналогичным путем получаем

$$k \operatorname{ctg} ka \rightarrow -\infty. \quad (19.6б)$$

Второй случай проще. Собственные функции обращаются на перегородке в нуль, так что решение имеет вид

$$u_n^-(x) = \begin{cases} A \sin k_n^-(x+a), & -a \leq x < 0, \\ A \sin k_n^-(x-a), & 0 < x \leq a, \end{cases} \quad (19.7a)$$

$$k_n^- a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3 \dots,$$

$$u_n^-(-x) = -u_n^-(x), \quad |A|^2 = \frac{1}{a}.$$

Что же касается уравнения (19.6а), то оно позволяет определить собственные значения k_n^+ лишь численно. Исключение представляют только два предельных случая:

1) полностью непроницаемая перегородка ($\Omega \rightarrow \infty$), когда для собственных значений получается тот же результат, что и в случае уравнения (19.6б), т. е. $k_n^+ = n\pi$;

2) полностью проницаемая перегородка ($\Omega = 0$), когда $k_n^+ = (n - \frac{1}{2})\pi$.

Таким образом, при конечном коэффициенте непроницаемости собственное значение k_n^+ заключено между k_n^- и k_{n-1}^- , т. е. уровни с положительной и отрицательной четностями так же, как и в предыдущей задаче, чередуются. Собственные функции можно записать в виде

$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A \sin k_n^+(x+a), & -a \leq x < 0, \\ +A \sin k_n^+(x-a), & 0 < x \leq +a, \end{cases}$$

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi < k_n^+ a < n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (19.76)$$

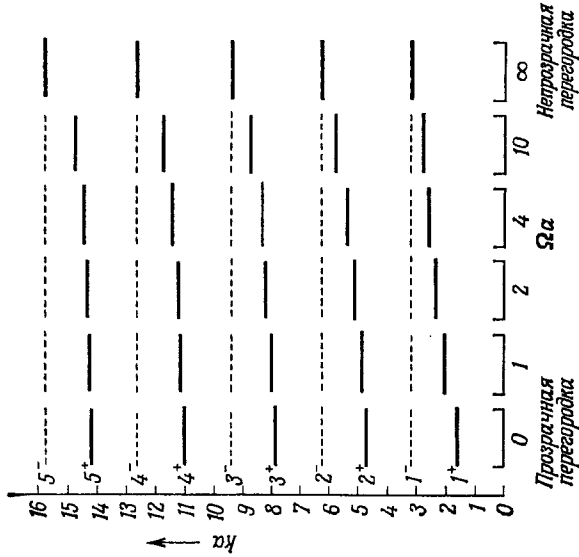
$$u_n^+(-x) = u_n^+(x), \quad |A|^2 = \frac{2k_n^+}{2k_n^+ a - \sin 2k_n^+ a}.$$

Их значения при $x=0$ конечны, а на графиках имеются изломы.

В прилагаемой таблице даны численные значения произведения $k_n^+ a$, найденные с помощью уравнения (19.6а) для низших состояний при некоторых значениях безразмерного параметра Ωa :

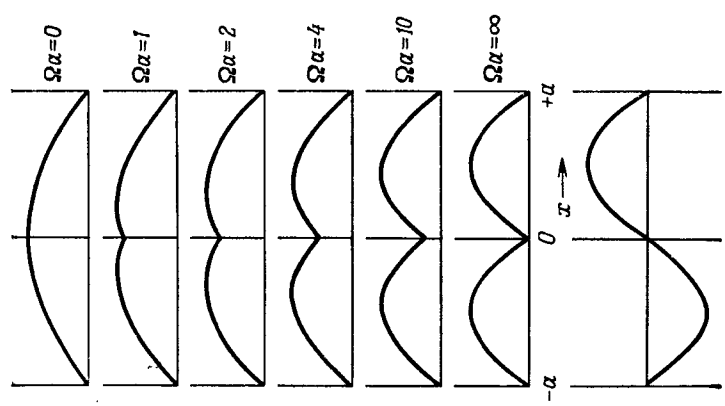
| Ωa | $n=1$ | $n=2$ | $n=3$ | $n=4$ | $n=5$ |
|------------|-------|-------|-------|--------|--------|
| 0 | 1,571 | 4,712 | 7,854 | 10,996 | 14,137 |
| 1/4 | 1,715 | 4,765 | 7,886 | 11,018 | 14,155 |
| 1/2 | 1,835 | 4,816 | 7,917 | 11,040 | 14,171 |
| 1 | 2,023 | 4,915 | 7,979 | 11,085 | 14,208 |
| 2 | 2,282 | 5,091 | 8,097 | 11,173 | 14,276 |
| 4 | 2,568 | 5,361 | 8,305 | 11,335 | 14,408 |
| 10 | 2,866 | 5,763 | 8,711 | 11,704 | 14,734 |
| ∞ | 3,142 | 6,283 | 9,425 | 12,566 | 15,708 |

Полученные таким образом уровни изображены на фиг. 3, где сплошные линии относятся к состояниям с положительной четностью, а пунктирные — к состояниям с отрицательной. Крайним слева на фиг. 3 показан случай $\Omega = 0$, когда перегородка полностью прозрачна, что соответствует ситуации, обрисованной в задаче 18. Чем непрозрачней становится перегородка, т. е. по мере приближения к правому краю фигуры, тем выше подни-



Ф и г. 3. Расположение уровней при различных значениях коэффициента непроницаемости перегородки.

Сплошные линии — состояния с положительной четностью, пунктирные линии — состояния с отрицательной четностью.



Ф и г. 4. Волновые функции двух первых стационарных состояний при различных значениях коэффициента непроницаемости перегородки. Вверху — состояние 1^+ , внизу — состояние 1^- .

маются уровни с положительной четностью; уровни же с отрицательной четностью остаются на прежнем месте. Это находит отражение и в поведении четных собственных функций. В качестве примера одна такая функция для $n=1$ показана на фиг. 4 (волновые функции не нормированы). В случае непроницаемой перегородки ($\Omega \rightarrow \infty$) она при $x=0$ обращается в нуль, и обе части ящика становятся независимыми друг от друга. За исключением знака в левой части ящика эта функция совпадает с первой нечетной собственной функцией, показанной в нижней части фиг. 4; таким образом, в пределе $\Omega \rightarrow \infty$ энергетические уровни становятся вырожденными (крайняя правая полоса на фиг. 3).

Задача 20. Полупроницаемая перегородка в виде δ -образного потенциального барьера

Потенциальную стенку предыдущей задачи с равным успехом можно описать с помощью δ -функции Дирака, полагая

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x). \quad (20.1)$$

Докажите это и обсудите обусловленные наличием такой стенки граничные условия.

Решение. Нам нужно решить уравнение Шредингера

$$u'' + [k^2 - 2\Omega \delta(x)] u = 0. \quad (20.2)$$

Прежде всего мы видим, что и дифференциальное уравнение (20.2), и граничные условия $u(\pm a) = 0$ инвариантны относительно инверсии $x \rightarrow -x$. Следовательно, решениями этой задачи, которая определяется дифференциальным уравнением и граничными условиями, могут быть только собственные функции оператора четности (он заменяет x на $-x$). В этом можно убедиться следующим образом. Всякую функцию $u(x)$ можно разбить на две части: четную $f(x) = f(-x)$ и нечетную $g(x) = -g(-x)$, поэтому

$$\begin{aligned} u(x) &= Af(x) + Bg(x), \\ u(-x) &= Af(x) - Bg(x). \end{aligned}$$

Если $u(x)$ есть решение нашей задачи, то таковым будет и $u(-x)$, а так как вырождение отсутствует, решение с точностью до мультипликативной постоянной, скажем α , должно быть однозначным. Следовательно,

$$u(-x) = \alpha u(x),$$

или

$$Af(x) - Bg(x) = \alpha [Af(x) + Bg(x)].$$

Так как f и g линейно независимы, последнее возможно тогда и только тогда, когда $A = \alpha A$ и $B = -\alpha B$, т. е. когда $\alpha = 1$,

$B=0$, так что $u(x)$ — четная функция, или же когда $\alpha = -1$, $A=0$, так что $u(x)$ — нечетная функция.

Рассмотрим теперь окрестность вблизи потенциальной стенки. Интегрирование уравнения (20.2) по указанной окрестности [функция $u(x)$ предполагается непрерывной] дает

$$u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega u(0). \quad (20.3)$$

Другими словами, логарифмическая производная

$$L(x) = \frac{u'(x)}{u(x)} \quad (20.4)$$

терпит на стенке разрыв со скачком 2Ω :

$$L(+0) - L(-0) = 2\Omega. \quad (20.5)$$

Таким образом, довольно трудоемкую предельную процедуру, использованную нами в задаче 19, можно заменить в известной мере искусственным, но очень простым граничным условием на потенциальной стенке. Следует отметить, что мы получили это граничное условие, рассматривая поведение дифференциального уравнения лишь в непосредственной окрестности потенциальной стенки; поэтому оно должно удовлетворяться и в том случае, когда дополнительно имеется какой-либо несингулярный потенциал $V(x)$, а также любые граничные условия, наложенные в каком-либо ином месте.

Обратимся теперь к вопросу о собственных функциях. Что касается *нечетных* решений, то функции $u_n^-(x)$ обращаются в нуль на потенциальной стенке: $u_n^-(0) = 0$. Но тогда в силу равенства (20.3) производная не будет иметь никакого скачка и будет непрерывной. Таким образом, оказывается, что наличие перегородки не влияет на нечетные решения, каков бы ни был коэффициент непроницаемости. Это полностью согласуется с результатом, полученным в задаче 19 [см. равенства (19.7a)].

С другой стороны, *четные* решения по необходимости должны иметь вид, предписываемый равенствами (19.7b):

$$u_n^+(x) = \begin{cases} -A \sin k_n^+(x+a), & -a \leq x < 0, \\ +A \sin k_n^+(x-a), & 0 < x \leq a. \end{cases} \quad (20.6)$$

Отсюда

$$L(+0) = -k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a, \quad L(-0) = k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a,$$

так что в силу условия (20.5)

$$k_n^+ \operatorname{ctg} k_n^+ a = -\Omega$$

в согласии с уравнением (19.6a). Таким образом, дальнейшие рассуждения дословно повторяют соответствующие рассуждения задачи 19.

Задача 21. Рассеяние на δ -образном потенциальном барьере

Слева на потенциальный барьер

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \delta(x) \quad (21.1)$$

падает поток частиц с энергией E . Показать, что наличие барьера приводит к появлению разбегающейся в обе стороны от него „рассеянной“ волны.

Решение. Всюду, кроме бесконечно малой окрестности точки $x=0$, общее решение уравнения Шредингера можно записать в виде

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k > 0, \quad (21.2)$$

где A и B — константы, имеющие различные значения для областей $x < 0$ и $x > 0$; подбирая их, можно добиться, чтобы решение (21.2) удовлетворяло граничному условию. Наше решение можно записать несколько иначе, если выбрать нормировку таким образом, чтобы амплитуда падающей волны равнялась единице,

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ (1+F)e^{ikx}, & x > 0. \end{cases} \quad (21.3)$$

Здесь B и F — соответственно амплитуды рассеяния назад и вперед.

Согласно равенству (20.3), поведение функции $u(x)$ в точке $x=0$ определяется условиями

$$u(+0) = u(-0) \quad \text{и} \quad u'(+0) - u'(-0) = 2\Omega u(0). \quad (21.4)$$

Эти соотношения дают $B = F$ и

$$ik(1+F) - ik(1-B) = 2\Omega(1+B),$$

поэтому окончательно

$$B = F = \frac{\Omega}{ik - \Omega}. \quad (21.5)$$

В решении (21.3) можно различить три волны: падающую волну единичной интенсивности, отраженную с интенсивностью $|B|^2$ и прошедшую с интенсивностью $|1+F|^2$. Из соотношения (21.5) следует

$$|B|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + k^2}, \quad |1+F|^2 = \frac{k^2}{\Omega^2 + k^2}. \quad (21.6)$$

Это приводит к закону сохранения (уравнение непрерывности)

$$1 = |B|^2 + |1+F|^2, \quad (21.7)$$

согласно которому сумма интенсивностей прошедшей и отраженной волн равна интенсивности падающей волны.

Если потенциальный барьер почти непроницаем ($\Omega \rightarrow \infty$), то в силу (21.5) $B \approx -1$ и $1+F \approx 0$, поэтому мы имеем почти

полное отражение. Если же потенциальный барьер почти прозрачен ($\Omega \rightarrow 0$), то

$$B = F \approx \frac{\Omega}{ik}$$

и интенсивность рассеянной волны становится обратно пропорциональной энергии частицы. Разумеется, это верно лишь в предельном случае высоких энергий и не имеет места при малых энергиях частицы ($k \leq \Omega$). Здесь мы имеем дело с частным случаем первого борновского приближения, которое справедливо, как известно, при высоких энергиях. Следует, однако, отметить, что для справедливости последнего вовсе *не требуется* (как иногда утверждают), чтобы кинетическая энергия была *всюду* велика по сравнению с потенциальной энергией $V(x)$. Действительно, в приведенном примере потенциальная энергия при $x = 0$ становится даже бесконечно большой.

Равенство амплитуд рассеяния вперед и назад для любых значений энергии является специфической чертой потенциала (21.1).

Задача 22. Рассеяние на симметричном потенциальном барьере

Поток частиц с энергией E падает на потенциальный барьер $V(x)$, ограниченный областью $-a \leq x \leq a$. Предполагается, что потенциал представляет собой четную функцию x :

$$V(x) = V(-x). \quad (22.1)$$

Требуется выразить амплитуды рассеяния вперед и назад через логарифмические производные волновой функции в точках $x = \pm a$.

Решение. Из условия симметрии (22.1) вытекает важное следствие: при любом значении энергии E уравнение Шредингера имеет как четное решение

$$u_+(x) = u_+(-x), \quad u'_+(x) = -u'_+(-x), \quad (22.2a)$$

так и нечетное решение

$$u_-(x) = -u_-(-x), \quad u'_-(x) = u'_-(-x). \quad (22.2b)$$

Эти решения, разумеется, линейно независимы, поэтому общее решение можно записать в виде их произвольной линейной комбинации. В интервале $-a \leq x \leq a$ частные решения u_+ и u_- в крайнем случае можно определить с помощью численных методов, положив в точке $x = 0$

$$u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0$$

и

$$u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1.$$

Конечно, при этом нормировка базисных решений оказывается довольно произвольной. Таким образом, мы можем вычислить

их логарифмические производные в точке $x = a$, которые для удобства запишем в безразмерном и не зависящем от их относительной нормировки виде

$$au'_+(a)/u_+(a) = L_+, \quad au'_-(a)/u_-(a) = L_-. \quad (22.3)$$

Логарифмические производные $au'_\pm(-a)/u_\pm(-a)$ в точке $x = -a$ в силу соотношений (22.2) будут равны $-L_+$ и $-L_-$.

Решение, отвечающее падающей слева волне с единичной амплитудой, имеет вид

$$u(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Be^{-ikx}, & -\infty < x \leq -a, \\ C_1 u_+(x) + C_2 u_-(x), & -a \leq x \leq a, \\ (1+F)e^{ikx}, & a \leq x < \infty. \end{cases} \quad (22.4)$$

Требование непрерывности $u(x)$ и $u'(x)$ в точках $x = \pm a$ дает четыре условия:

$$e^{-ika} + Be^{ika} = C_1 u_+(a) - C_2 u_-(a), \quad (22.5a)$$

$$ik(e^{-ika} - Be^{ika}) = -C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a), \quad (22.5б)$$

$$(1+F)e^{ika} = C_1 u_+(a) + C_2 u_-(a), \quad (22.5в)$$

$$ik(1+F)e^{ika} = C_1 u'_+(a) + C_2 u'_-(a). \quad (22.5г)$$

Складывая равенства (22.5a) и (22.5в) и вычитая из равенства (22.5б) равенство (22.5г), получаем справа соответственно $2C_1 u_+(a)$ и $2C_1 u'_+(a)$. Взяв теперь их отношение, находим

$$L_+ = ika \frac{-e^{-ika} + (1+F+B)e^{ika}}{e^{-ika} + (1+F+B)e^{ika}}. \quad (22.6a)$$

Аналогичная процедура, но с переменной знаков дает

$$L_- = ika \frac{e^{-ika} + (1+F-B)e^{ika}}{-e^{-ika} + (1+F-B)e^{ika}}. \quad (22.6б)$$

Разрешая уравнения (22.6a) и (22.6б) относительно $1+F \pm B$ и полагая для простоты

$$ka = q, \quad (22.7)$$

окончательно получаем следующие выражения для амплитуд:

$$B = -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[\frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} + \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right], \quad (22.8a)$$

$$1+F = -\frac{1}{2} e^{-2iq} \left[\frac{L_+ + iq}{L_+ - iq} - \frac{L_- + iq}{L_- - iq} \right]. \quad (22.8б)$$

На основании уравнения непрерывности, следует ожидать, что сумма интенсивностей отраженной и прошедшей волн будет равна интенсивности падающей волны. Действительно, из соотношений (22.8a) и (22.8б) следуют формулы

$$|B|^2 = \frac{(L_+ L_- + q^2)^2}{(L_+ L_- + q^2)^2 + q^2 (L_+ - L_-)^2}, \quad (22.9a)$$

$$|1+F|^2 = \frac{q^2 (L_+ - L_-)^2}{(L_+ L_- + q^2)^2 + q^2 (L_+ - L_-)^2}, \quad (22.9б)$$

так что ожидаемое равенство

$$|B|^2 + |1 + F|^2 = 1, \quad (22.10)$$

очевидно, выполняется.

Таким образом, проблема нахождения амплитуд рассеяния вперед и назад свелась к отысканию логарифмических производных (22.3) четной и нечетной волновых функций в точке $x = a$. Разумеется, эту последнюю задачу нельзя решить, пока потенциал (22.1) не задан в явном виде.

В противоположность результату задачи 21 равенство $B = F$ теперь уже не имеет места. Если

$$q |L_+ - L_-| > |L_+ L_- + q^2|,$$

то преобладает рассеяние вперед, в противном случае — рассеяние назад.

Задача 23. Отражение от прямоугольного барьера

Общую формулу, полученную в задаче 22, применить к потенциальному барьеру вида

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = k_0^2, \quad |x| \leq a \quad (23.1)$$

и $V = 0$ вне этого интервала. Вычислить коэффициент прохождения.

Решение. Внутри барьера уравнение Шредингера запишем в виде:

$$u'' + (k^2 - k_0^2)u = 0. \quad (23.2)$$

Оно имеет решения двух типов: для кинетической энергии ниже порога ($k < k_0$) и для кинетической энергии выше порога ($k > k_0$). Мы начнем с первого случая. Положим

$$k_0^2 - k^2 = \kappa^2, \quad (23.3)$$

тогда

$$u'' - \kappa^2 u = 0.$$

Поэтому для четного и нечетного решений имеем соответственно

$$u_+(x) = \text{ch } \kappa x, \quad u_+(0) = 1, \quad u'_+(0) = 0 \quad (23.4a)$$

и

$$u_-(x) = \frac{1}{\kappa} \text{sh } \kappa x, \quad u_-(0) = 0, \quad u'_-(0) = 1. \quad (23.4b)$$

Следовательно,

$$L_+ = au'_+(a)/u_+(a) = \kappa a \text{ th } \kappa a, \quad (23.5a)$$

$$L_- = au'_-(a)/u_-(a) = \kappa a \text{cth } \kappa a. \quad (23.5b)$$

Для коэффициента прохождения с помощью формулы (22.9б) после элементарных преобразований получаем

$$T \equiv |1 + F|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2k\kappa}\right)^2 \operatorname{sh}^2 2\kappa a}. \quad (23.6)$$

Коэффициент отражения находится с помощью (22.10):

$$R \equiv |B|^2 = 1 - T. \quad (23.7)$$

В классической механике падающий слева поток целиком отразился бы от барьера и мы имели бы $|B|^2 = 1$ и $|1 + F|^2 = 0$. Согласно же формуле (23.6), это может быть только при условии $\kappa a \rightarrow \infty$, т. е. только в том случае, когда над энергетическим уровнем частицы возвышается огромная „потенциальная гора“. Коэффициент прохождения становится при этом очень малым, хотя и конечным („туннельный эффект“), и приближенно его можно записать в виде

$$T = \frac{16k^2\kappa^2}{k_0^4} e^{-4\kappa a}. \quad (23.8)$$

Порядок величины коэффициента прохождения в основном определяется экспоненциальным множителем.

В дальнейшем для показателя экспоненты нами будет получено общее выражение (см. задачу 116) в виде интеграла

$$4\kappa a = 2 \int_{-a}^{+a} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)} dx$$

при произвольном потенциале $V(x)$.

Когда кинетическая энергия частицы превышает высоту потенциального барьера, величина κ , определенная соотношением (23.3) становится чисто мнимой. Вводя для удобства обозначение

$$K^2 = k^2 - k_0^2 = -\kappa^2, \quad (23.9)$$

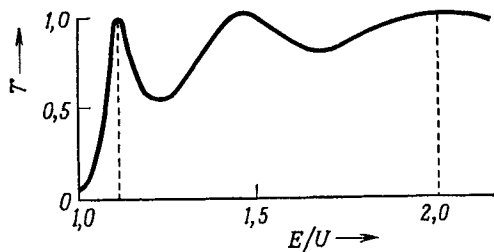
мы можем теперь вместо (23.6) написать

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_0^2}{2kK}\right)^2 \sin^2 2Ka}. \quad (23.10)$$

В классической механике при рассматриваемых энергиях должно было бы быть $T = 1$ и $R = 0$, коэффициент же прохождения, определяемый формулой (23.10), достигает максимального значения $T = 1$ только при $2Ka = n\pi$ ($n = 1, 2, 3, \dots$). Между этими максимумами в точках $2Ka = (n + 1/2)\pi$ находятся минимумы, которые лежат тем ближе к значению $T = 1$, чем меньше множитель при синусе в формуле (23.10), другими словами, чем

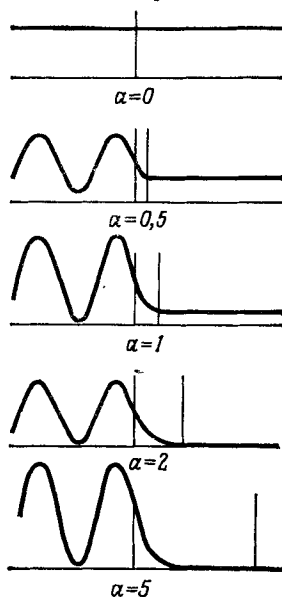
больше энергия частицы по отношению к высоте потенциального барьера.

Зависимость коэффициента прохождения T от отношения энергии к высоте барьера (скажем, U) показана на фиг. 5, где



Фиг. 5. Зависимость коэффициента прохождения T от отношения энергии к высоте барьера (при $E > U$).

изображен график функции $T(E/U)$ для случая $2k_0a = 3\pi$. На фиг. 6 иллюстрируется поведение волновой функции: на ней изображена зависимость плотности вероятности $|u|^2$ от координаты x . По правую сторону от барьера $|u|^2 = |1 + F|^2$, т. е. плотность вероятности постоянна, слева же от барьера имеет место интерференция между отраженной и падающей волнами. На фиг. 6 показан случай $k^2 = \kappa^2 = 1/2 k_0^2$ для барьеров различной ширины. Чем шире барьер, тем меньше интенсивность прошедшей волны и тем ярче выражено явление интерференции.



Фиг. 6. Зависимость плотности вероятности $|u|^2$ от координаты x для потока частиц, падающих слева на прямоугольный барьер в случае $E < U$.

Парой вертикальных линий отмечена ширина барьера a . Осцилляции слева от барьера обусловлены интерференцией между отраженной и падающей волнами.

Задача 24. Инверсия отражения

Пусть слева на препятствие в виде потенциального барьера $V(x) > 0$, расположенного в области $0 < x < a$, падает волна. Показать, что независимо от формы потенциала коэффициент отражения будет иметь то же самое значение и в том случае, когда волна падает на барьер справа.

Решение. Пусть $u(x)$ и $v(x)$ — два независимых действительных решения уравнения Шредингера для области $0 < x < a$ с вронскианом

$$uv' - v u' = 1. \quad (24.1)$$

В случае волны, падающей слева, волновая функция имеет вид¹⁾

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0, \\ Au(x) + Bv(x), & 0 < x < a, \\ Ce^{ik(x-a)}, & x > a, \end{cases} \quad (24.2)$$

и требование непрерывности ψ и ψ' в точках $x=0$ и $x=a$ дает

$$\begin{aligned} 1 + R &= Au(0) + Bv(0), \\ ik(1 - R) &= Au'(0) + Bv'(0), \\ Au(a) + Bv(a) &= C, \\ Au'(a) + Bv'(a) &= ikC. \end{aligned} \quad (24.3)$$

С помощью соотношения (24.1) из последней пары уравнений находим

$$\begin{aligned} A &= C[v'(a) - ikv(a)], \\ B &= -C[u'(a) - iku(a)]. \end{aligned} \quad (24.4)$$

Подставив полученные для A и B выражения в первую пару уравнений (24.3), имеем

$$1 + R = (\rho_{0a} - iq)C, \quad 1 - R = (\rho_{a0} - ir)C, \quad (24.5)$$

где в целях сокращения записи положено

$$\begin{aligned} \rho_{0a} &= u(0)v'(a) - v(0)u'(a), \\ \rho_{a0} &= u(a)v'(0) - v(a)u'(0), \\ q &= k[u(0)v(a) - v(0)u(a)], \\ r &= \frac{1}{k}[u'(0)v'(a) - v'(0)u'(a)]. \end{aligned} \quad (24.6)$$

С помощью соотношений (24.5) окончательно получаем

$$R = \frac{(\rho_{0a} - \rho_{a0}) - i(q - r)}{(\rho_{0a} + \rho_{a0}) - i(q + r)}, \quad (24.7)$$

так что коэффициент отражения будет равен

$$|R|^2 = \frac{(\rho_{0a} - \rho_{a0})^2 + (q - r)^2}{(\rho_{0a} + \rho_{a0})^2 + (q + r)^2}. \quad (24.8)$$

Рассмотрим теперь второй случай, когда первоначальная волна падает справа. Для этого волновую функцию (24.2) достаточно заменить выражением

$$\tilde{\psi} = \begin{cases} \tilde{C}e^{-ikx}, & x < 0, \\ \tilde{A}u(x) + \tilde{B}v(x), & 0 < x < a, \\ e^{-ik(x-a)} + \tilde{R}e^{ik(x-a)}, & x > a. \end{cases} \quad (24.9)$$

¹⁾ Через ψ мы в этой задаче обозначаем пространственную часть волновой функции, так как символ u уже использован с иной целью.

Условия непрерывности теперь гласят:

$$\begin{aligned} 1 + \bar{R} &= \bar{A}u(a) + \bar{B}v(a), \\ -ik(1 - \bar{R}) &= \bar{A}u'(a) + \bar{B}v'(a), \\ \bar{A}u(0) + \bar{B}v(0) &= \bar{C}, \\ \bar{A}u'(0) + \bar{B}v'(0) &= -ik\bar{C}. \end{aligned} \quad (24.10)$$

Они имеют ту же структуру, что и уравнения (24.3), из которых их можно получить, заменив k на $-k$ и поменяв аргументы a и 0 местами. Это преобразование применительно к соотношениям (24.6) дает

$$p_{0a} \rightarrow p_{a0}, \quad p_{a0} \rightarrow p_{0a}, \quad q \rightarrow q, \quad r \rightarrow r. \quad (24.11)$$

Таким образом, окончательные формулы будут отличаться от формул (24.7) и (24.8) лишь тем, что p_{0a} и p_{a0} поменяются местами. Так как выражение (24.8) симметрично по отношению к p_{0a} и p_{a0} , то коэффициент отражения

$$|\bar{R}|^2 = |R|^2 \quad (24.12)$$

будет иметь одно и то же значение для волны, падающей слева, и для волны, падающей справа. Это, однако, не имеет места для амплитуды R . Действительно, равенство (24.7), будучи записано в виде отношения $R = \alpha/\beta$ двух комплексных чисел α и β , согласно соотношениям (24.11), преобразуется к виду $\bar{R} = -\alpha^*\beta$.

Задача 25. Прямоугольная потенциальная яма

Найти связанные состояния и соответствующие им собственные значения в случае прямоугольной потенциальной ямы

$$V(x) = \begin{cases} -U, & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases} \quad (25.1)$$

Решение. Результаты двух предыдущих задач позволяют без труда разобраться в поведении состояний с положительной энергией, поэтому достаточно рассмотреть случай отрицательных энергий, соответствующих связанным состояниям.

Потенциал инвариантен по отношению к инверсии $V(x) = V(-x)$, так что решения обязаны быть либо четными, либо нечетными (см. задачу 20). Положив

$$E = -\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m}, \quad U = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}, \quad k^2 = k_0^2 - \chi^2, \quad (25.2)$$

можно записать эти решения в следующем виде:

четные

$$u_+(x) = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \cos ka e^{\kappa(a-x)}, & x > a, \end{cases}$$

$$u_+(-x) = u_+(x),$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{1}{\kappa} \cos^2 ka;$$
(25.3a)

нечетные

$$u_-(x) = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \sin ka e^{\kappa(a-x)}, & x > a, \end{cases}$$

$$u_-(-x) = -u_-(x),$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{1}{\kappa} \sin^2 ka.$$
(25.3б)

Выше амплитуды внутри и вне потенциальной ямы были выбраны таким образом, чтобы функция $u(x)$ оставалась непрерывной в точке $x = a$. Нормировочная постоянная была определена из условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u|^2 dx = 1.$$

Требование непрерывности u' в точке $x = a$ дает еще условие:

четные

$$-k \sin ka = -\kappa \cos ka,$$

или

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k};$$
(25.4a)

нечетные

$$k \cos ka = -\kappa \sin ka,$$

или

$$\operatorname{ctg} ka = -\frac{k}{\kappa}.$$
(25.4б)

С помощью соотношений (25.4) и (25.2) можно упростить выражения для нормировочных постоянных, получая в обоих случаях одно и то же равенство:

$$\frac{1}{A_{\pm}^2} = a + \frac{1}{\kappa}.$$
(25.5)

Чтобы из уравнений (25.4) можно было найти собственные значения, заменим в правых частях этих уравнений величину κ в соответствии с выражением (25.2) и введем обозначение

$$C = k_0 a.$$
(25.6)

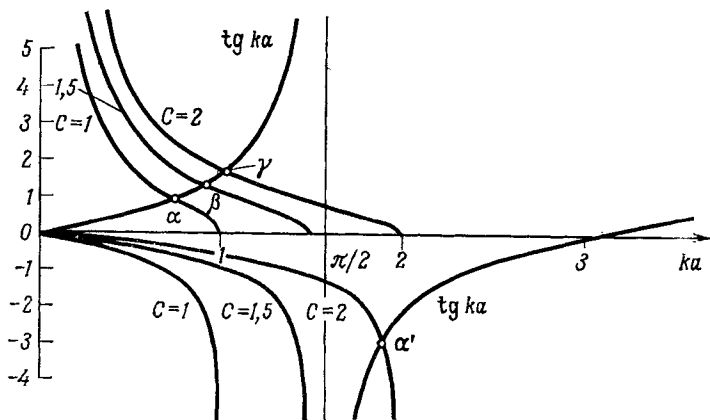
В результате получим
четные

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}{ka}, \quad (25.7a)$$

нечетные

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{ka}{\sqrt{C^2 - (ka)^2}}. \quad (25.7б)$$

При данном потенциале величина C является постоянной, зависящей лишь от размеров ямы ($C^2 \sim Ua^2$), и уравнения (25.7a) и



Фиг. 7. Графическое решение уравнений (25.7a) и (25.7б).

На фигуре показаны точки пересечения кривых, изображающих правые части уравнений при различных значениях параметра C , с тангенсоидой $\operatorname{tg} ka$. Кривые с положительными ординатами относятся к четным состояниям, кривые с отрицательными ординатами — к нечетным.

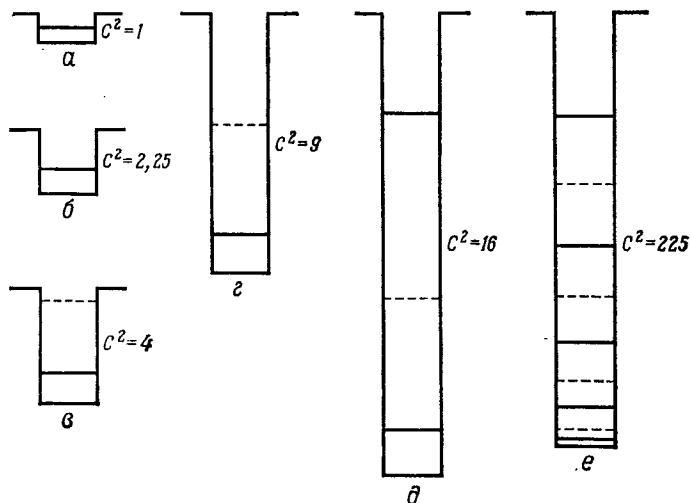
(25.7б) дают возможность определить все значения ka , а тем самым и все значения энергии

$$E = -U \left[1 - \left(\frac{ka}{C} \right)^2 \right], \quad (25.8)$$

реализующиеся в яме данных размеров.

На фиг. 7 $\operatorname{tg} ka$, а также правые части уравнений (25.7a) и (25.7б) показаны как функции переменной ka . Собственные значения находятся как абсциссы точек пересечения двух последних кривых с тангенсоидой. Упомянутые кривые, разумеется, зависят от параметра C , определяемого размерами ямы. Начав, например, со значения $C=1$, мы получаем одну точку пересечения, обозначенную буквой α , в четном случае и вообще не получаем ни одного пересечения в нечетном случае. Следовательно, в яме такого размера имеется не более одного связанного состояния с положительной четностью. Эта яма с соответствующим уровнем показана на фиг. 8,а. Для ямы больших

размеров, $C = 1,5$, кривые на фиг. 7 пересекаются в точке β ; по-прежнему имеется только одно состояние с положительной четностью (фиг. 8, б), причем $E_\beta < E_\alpha$, поскольку $(ka)_\beta > (ka)_\alpha$. Если еще увеличить размер ямы, взяв, например, $C = 2$, то пересечение в точке γ даст еще более низкое состояние с положительной четностью ($E_\gamma < E_\beta$), но, кроме того, к нему добавится



Фиг. 8. Энергетические уровни (а—е) в потенциальных ямах при различном значении характеристического параметра C .

Сплошные линии — состояния с положительной четностью, пунктирные линии — состояния с отрицательной четностью.

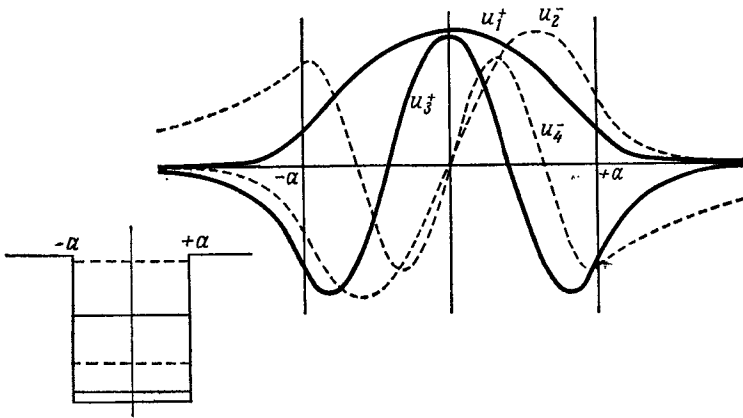
состояние с отрицательной четностью, соответствующее пересечению в точке α' (фиг. 8, в). С дальнейшим увеличением размеров ямы ее „вместимость“ возрастает (фиг. 8, г—е): число связанных состояний растет линейно с ростом C , образуя чередующиеся серии состояний с положительной и отрицательной четностью. Что касается собственных функций, то они следуют общему правилу: чем больше у них нулей, тем выше их положение на шкале энергий. Волновые функции четырех низших состояний показаны для случая $C = 5$ на фиг. 9.

В классической механике частица могла бы колебаться между стенками (точки $x = \pm a$), ограничивающими яму, при любом значении энергии. Вне ямы ее кинетическая энергия была бы отрицательна, поэтому область вне ямы классически недостижима. В квантовой механике мы не имеем такого жесткого ограничения. Вероятность P_i обнаружить частицу внутри ямы оказы-

ваится меньше единицы:

$$P_i = \int_{-a}^{+a} |u|^2 dx = 1 - \frac{k^2}{k_0^2(1 + \kappa a)}. \quad (25.9)$$

Таким образом, имеется конечная вероятность того, что частица находится снаружи. Для всякого конечного интервала вне ямы



Фиг. 9. Энергетические уровни и собственные функции для случая $C=5$. Сплошные линии — состояния с положительной четностью, пунктирные линии — состояния с отрицательной четностью.

вероятность убывает экспоненциально, как $e^{-2\kappa(|x|-a)}$, по мере увеличения расстояния $|x|-a$ между частицей и ямой.

Задача 26. Прямоугольная потенциальная яма между двумя бесконечными стенками

Найти решения уравнения Шредингера для потенциала, изображенного на фиг. 10. Особо рассмотреть состояния с положительной энергией в предельном случае $l \rightarrow \infty$.

Решение. Начнем с беглого рассмотрения „связанных“ состояний, для которых $E < 0$. Используя прежние обозначения k^2 , k_0^2 и κ^2 , определенные посредством (25.2), и условие нормировки

$$\int_{-l}^{+l} |u|^2 dx = 1,$$

можем записать волновые функции следующим образом:

четные

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka \operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)}, & a \leq x \leq l, \end{cases}$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] + \frac{\cos^2 ka}{\kappa} \left[\operatorname{ctg} \kappa(l-a) - \frac{\kappa(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \kappa(l-a)} \right]; \quad (26.1a)$$

нечетные

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka \operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)}, & a \leq x \leq l, \end{cases}$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} \left[\operatorname{cth} \kappa(l-a) - \frac{\kappa(l-a)}{\operatorname{sh}^2 \kappa(l-a)} \right]. \quad (26.1b)$$

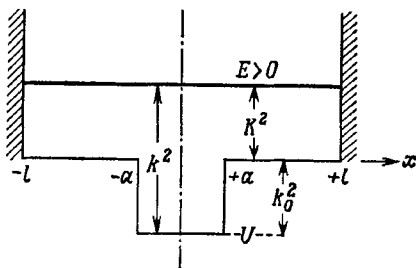
Здесь, как и ранее в задаче 25, мы уже позаботились о непрерывности $u(x)$ при $x=a$, но требование непрерывности производной $u'(x)$ в этой точке дает нам дополнительное условие:

четные

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k} \operatorname{cth} \kappa(l-a), \quad (26.2a)$$

нечетные

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\kappa} \operatorname{th} \kappa(l-a), \quad (26.2b)$$



Ф и г. 10.

которое и позволяет вычислить собственные значения. Мы не будем, однако, углубляться в дальнейшие детали и лишь заметим, что при

$$\kappa(l-a) \gg 1$$

обе гиперболические функции быстро стремятся к единице. При этом уравнения (26.2a) и (26.2b) переходят в уравнения для собственных значений (25.4a) и (25.4b) предыдущей задачи, а нормировочные соотношения (26.1a) и (26.1b) для $1/A_{\pm}^2$ — в соответствующие соотношения (25.3a) и (25.3b). В выражениях же (26.1a) и (26.1b) для самих волновых функций, когда $|x| < l$, но $\kappa(l-x) \gg 1$, можно положить

$$\frac{\operatorname{sh} \kappa(l-x)}{\operatorname{sh} \kappa(l-a)} \approx e^{\kappa(a-x)},$$

снова возвращаясь, таким образом, к волновым функциям (25.3a) и (25.3b).

Гораздо более интересен вопрос о состояниях с положительной энергией. При конечных значениях l имеются дискретные собственные значения, образующие по мере роста l все более

плотную систему уровней, которая в предельном случае $l \rightarrow \infty$ переходит в континуум. Введя вместо $E > 0$ новую переменную

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}, \quad K^2 = -\kappa^2 = k^2 - k_0^2, \quad (26.3)$$

мы можем записать волновые функции в виде:

четные

$$u_+ = \begin{cases} A_+ \cos kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_+ \frac{\cos ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l, \end{cases}$$

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] - \frac{\cos^2 ka}{K} \left[\operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right]; \quad (26.4a)$$

нечетные

$$u_- = \begin{cases} A_- \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ A_- \frac{\sin ka}{\sin K(l-a)} \sin K(l-x), & a \leq x \leq l, \end{cases}$$

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] - \frac{\sin^2 ka}{K} \left[\operatorname{ctg} K(l-a) - \frac{K(l-a)}{\sin^2 K(l-a)} \right]. \quad (26.4b)$$

Согласно этим выражениям, функция $u(x)$ уже непрерывна, требование же непрерывности производной $u'(x)$ снова дает условие:

четные

$$\operatorname{tg} ka = \frac{K}{k} \operatorname{ctg} K(l-a), \quad (26.5a)$$

нечетные

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{K} \operatorname{tg} K(l-a), \quad (26.5b)$$

которое позволяет вычислить собственные значения. Используя это условие, мы можем заменить $\operatorname{ctg} K(l-a)$ во вторых скобках в нормировочных выражениях для $1/A_{\pm}^2$. В результате получим

$$\frac{1}{A_+^2} = \frac{1}{k} [ka + \sin ka \cos ka] +$$

$$+ (l-a) \left(\cos^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \sin^2 ka \right) - \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka \quad (26.6a)$$

и

$$\frac{1}{A_-^2} = \frac{1}{k} [ka - \sin ka \cos ka] +$$

$$+ (l-a) \left(\sin^2 ka + \frac{k^2}{K^2} \cos^2 ka \right) + \frac{k}{K^2} \sin ka \cos ka. \quad (26.6b)$$

Если $l \rightarrow \infty$, то второй член в этих выражениях неограниченно

возрастает, поэтому

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_+^2} &\approx l \left(\cos^2 ka + \frac{\hbar^2}{K^2} \sin^2 ka \right), \\ \frac{1}{A_-^2} &\approx l \left(\sin^2 ka + \frac{\hbar^2}{K^2} \cos^2 ka \right).\end{aligned}\quad (26.7)$$

Амплитуды вне ямы можно, однако, определить непосредственно из (26.4а) и (26.4б)

$$\frac{\sin^2 K(l-a)}{A_+^2 \cos^2 ka} \rightarrow l, \quad \frac{\sin^2 K(l-a)}{A_-^2 \sin^2 ka} \rightarrow l,$$

так что при $x > a$ обе волновые функции принимают вид

$$u_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{l}} \sin K(l-x). \quad (26.8)$$

Здесь величина l все еще входит в фазу волновой функции, но ее можно исключить, воспользовавшись снова уравнениями (26.5а) и (26.5б), определяющими собственные значения:

четные

$$Kl = \operatorname{arctg} \left(\frac{\frac{K}{k} + \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka}{\operatorname{tg} ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} Ka} \right), \quad (26.9a)$$

нечетные

$$Kl = \operatorname{arctg} \left(\frac{\operatorname{tg} Ka - \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka}{1 + \frac{K}{k} \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} Ka} \right). \quad (26.9б)$$

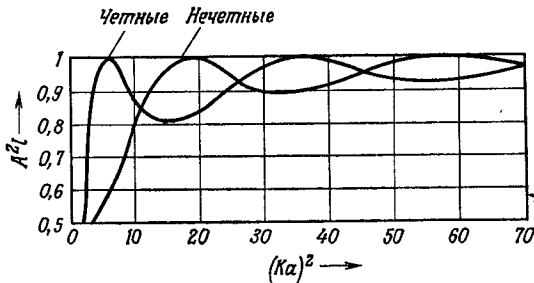
Наиболее примечательной особенностью этой системы волновых функций являются их *энергетические уровни*, плотность которых можно определить из уравнений (26.5а) и (26.5б) для случая очень больших, но все еще конечных значений l . Правые части этих уравнений пробегают всю действительную ось от $-\infty$ до ∞ , когда переменная Kl пробегает интервал шириной π . В каждом таком интервале существует ровно одно решение как у одного, так и у другого уравнения; поэтому мы получаем чередующиеся четные и нечетные уровни, расположенные в среднем на расстоянии $\Delta K = \pi/(2l)$ (в шкале переменной K) друг от друга. Среднее же расстояние между уровнями в энергетической шкале, согласно (26.3), равно

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} K \frac{\pi}{2l} = \frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m} E}. \quad (26.10)$$

Таким образом, среднее расстояние между последовательными уровнями растет лишь как $E^{1/2}$ и обратно пропорционально длине

нормировочного интервала. Следовательно, в пределе $l \rightarrow \infty$ дискретный энергетический спектр переходит в непрерывный.

Поведение амплитуды при переходе к непрерывному спектру для случая $k_0 a \equiv C = 2$ показано на фиг. 11. Безразмерная величина $A^2 l$ представляет собой меру квадрата амплитуды внутри ямы, когда нормировка на всем протяжении вне ямы остается одной и той же, а величина l велика. График этой величины в зависимости от $(Ka)^2$, т. е. в зависимости от энергии в безразмерных единицах, построен с помощью формул (26.7). Ясно, что



Фиг. 11. Виртуальные состояния в непрерывном спектре.

имеется бесконечное число последовательных значений энергии, для которых величина $A^2 l$ принимает максимальное значение, равное единице. Между максимумами лежат минимумы амплитуды, выраженные тем слабее, чем выше энергия (обратите внимание, что нижняя половина оси ординат на фиг. 11 не показана). При энергиях, соответствующих максимумам амплитуды, рассматриваемые состояния, хотя их энергия положительна, все еще сохраняют некоторые черты связанных состояний, так как в этих состояниях достигается максимально возможная концентрация волновой функции в области, занятой ямой. По этой причине о них часто говорят как о *виртуальных состояниях* в противоположность „истинным“ связанным состояниям с отрицательной энергией.

Задача 27. Виртуальные уровни

Потенциальная „полость“ между точками $x=0$ и $x=a$ ограничена справа, как это показано на фиг. 12, полупроницаемой стенкой (см. задачу 20) так, что между волновыми функциями внутри и вне полости существует лишь слабая связь. Показать, что при большом коэффициенте непроницаемости существуют узкие полосы энергии, для которых упомянутая связь становится довольно сильной. Рассмотреть числовой пример $\Omega a/\pi = 50$.

Решение. В данном случае спектр энергии непрерывен и волновые функции, нормированные так, чтобы их амплитуда равнялась единице вне полости, имеют вид

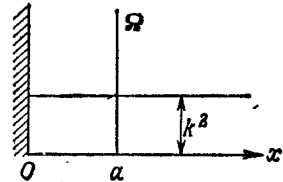
$$u(x) = \begin{cases} A \sin kx, & 0 \leq x \leq a, \\ \sin(kx + \delta), & a \leq x < \infty. \end{cases} \quad (27.1)$$

Граничные условия на стенке с конечным коэффициентом непроницаемости Ω , согласно задаче 20, выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} u(a+0) &= u(a-0), \\ u'(a+0) &= u'(a-0) + 2\Omega u(a). \end{aligned} \quad (27.2)$$

Для функций (27.1) это дает

$$\begin{aligned} \sin(ka + \delta) &= A \sin ka, \\ k \cos(ka + \delta) &= kA \cos ka + 2\Omega A \sin ka. \end{aligned}$$



Фиг. 12. Потенциальная полость, ограниченная полупроницаемой стенкой.

Эти два соотношения определяют фазовый угол δ :

$$\text{ctg}(ka + \delta) - \text{ctg} ka = 2 \frac{\Omega}{k} \quad (27.3)$$

и амплитуду A волновой функции внутри полости:

$$\frac{1}{A^2} = 1 + 4 \frac{\Omega}{k} \sin ka \cos ka + 4 \frac{\Omega^2}{k^2} \sin^2 ka, \quad (27.4)$$

или

$$\frac{1}{A^2} = 1 + 2 \frac{\Omega}{k} \sin 2ka + 2 \frac{\Omega^2}{k^2} (1 - \cos 2ka). \quad (27.4a)$$

В случае непроницаемой стенки ($\Omega \rightarrow \infty$) амплитуда A обращается в нуль: колебания, имеющиеся снаружи, не могут проникнуть внутрь полости—она оказывается совершенно не связанной с внешним пространством. Однако при больших, но конечных значениях Ω допустимо появление малых амплитуд $A \sim k/\Omega$. Если же значения тригонометрических функций в формуле (27.4) близки к нулю, то не исключено появление даже весьма больших амплитуд.

Пусть произведение ka велико по сравнению с π ($ka \gg 2\pi$), тогда полному периоду изменения тригонометрических функций будет соответствовать такой интервал изменения переменной k , в котором отношение Ω/k будет оставаться почти постоянным. В таком случае максимальные и минимальные значения величины A^2 с разумной степенью точности можно найти, дифференцируя выражение (27.4a) по переменной $2ka$ при условии $\Omega/k = \text{const}$:

$$\left[\frac{\partial (1/A^2)}{\partial (2ka)} \right]_{\Omega/k} = 2 \frac{\Omega}{k} \cos 2ka + 2 \frac{\Omega^2}{k^2} \sin 2ka = 0.$$

Таким образом, имеем

$$\operatorname{tg} 2ka = -\frac{k}{\Omega}. \quad (27.5)$$

Обозначая решения уравнения (27.5) через k_n и полагая

$$\frac{k_n}{\Omega} = \varepsilon_n, \quad (27.6)$$

получаем

$$2k_n a = n\pi - \operatorname{arctg} \varepsilon_n, \quad (27.7)$$

где n — целое число, и, следовательно,

$$\begin{aligned} \sin 2k_n a &= (-1)^{n+1} \frac{\varepsilon_n}{\sqrt{1 + \varepsilon_n^2}}, \\ \cos 2k_n a &= (-1)^n \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon_n^2}}. \end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в равенство (27.4а), для экстремальных значений величины $1/A^2$ находим при четных $n = 2, 4, 6, \dots$

$$\frac{1}{A_n^2} = 1 - \frac{2}{\sqrt{1 + \varepsilon_n^2}} + \frac{2}{\varepsilon_n^2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon_n^2}} \right), \quad (27.8a)$$

а при нечетных $n = 1, 3, 5, \dots$

$$\frac{1}{A_n^2} = 1 + \frac{2}{\sqrt{1 + \varepsilon_n^2}} + \frac{2}{\varepsilon_n^2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon_n^2}} \right). \quad (27.8b)$$

Так как $\varepsilon_n \ll 1$, то последние выражения можно разложить по степеням ε_n :

$$\frac{1}{A_n^2} = \frac{1}{4} \varepsilon_n^2 = \frac{k_n^2}{4\Omega^2} \quad \text{при } n = 2, 4, 6, \dots \quad (27.9a)$$

и

$$\frac{1}{A_n^2} = \frac{4}{\varepsilon_n^2} + 2 - \frac{1}{4} \varepsilon_n^2 \approx \frac{4\Omega^2}{k_n^2} \quad \text{при } n = 1, 3, 5, \dots \quad (27.9b)$$

Выше отброшены все члены, имеющие порядок ε_n^4 .

Таким образом, при четных значениях n , т. е. при значениях произведения ka , близких целым кратным π , мы имеем максимальные амплитуды:

$$A_{n, \text{ макс}} = \frac{2\Omega}{k_n} \gg 1, \quad (27.10)$$

а при нечетных n , т. е. для значений ka , близких полужелым кратным π , — минимальные амплитуды:

$$A_{n, \text{ мин}} = \frac{k_n}{2\Omega} \ll 1. \quad (27.11)$$

Следовательно, заметная связь внешнего пространства и полости имеет место, лишь при тех значениях энергии, которые близки

к энергиям, обеспечивающим выполнение соотношения (27.10), — только в этом случае наружная волна проникает заметным образом сквозь потенциальный барьер. С классической точки зрения это означает существование *резонансных* частот, при которых воздействие извне способно возбудить собственные колебания полости.

Согласно соотношению (27.7), резонансы имеют место, если произведение $k_n a$ лишь незначительно отличается от $n\pi$, где n — целое число, т. е. для тех значений k , при которых волновая функция внутри полости, определяемая формулой (27.1), весьма близка к собственной функции в случае непроницаемой стенки ($\Omega \rightarrow \infty$)

$$u_n(x) = A \sin \frac{\pi n x}{a}, \quad u_n(a) = 0.$$

Следовательно, резонансные уровни располагаются вблизи собственных значений энергии полости при $\Omega \rightarrow \infty$. По этой причине их называют *виртуальными уровнями*.

На фиг. 13 показано поведение амплитуды A при изменении произведения $2ka$ от 18π до 22π , а численное значение величины Ωa взято равным $50\pi = 157,08$. В этом случае $k/2\Omega \approx 0, 1$, и нетрудно видеть, что амплитуда A , как правило, имеет такой же порядок. Исключение представляет очень узкая область, расположенная немного левее точки $2ka = 20\pi$, где ее поведение носит типично резонансный характер. Разлагая величину $1/A^2$ в степенной ряд вблизи резонансной энергии, определяемой соотношением

$$2k_0 a = 2n\pi - \operatorname{arctg} \frac{k}{\Omega},$$

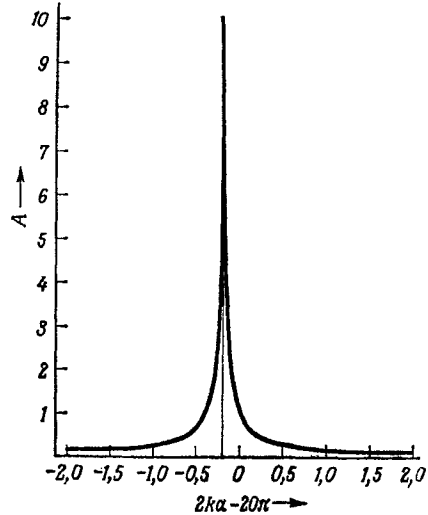
приближенно получаем

$$\frac{1}{A^2} = \frac{k^2}{4\Omega^2} \left[1 + \frac{4\Omega^4}{k^4} (2ka - 2k_0 a)^2 \right]. \quad (27.12)$$

Таким образом, ширина резонанса по порядку величины равна

$$\Delta k \sim \frac{k^2}{4\Omega^2 a}. \quad (27.13)$$

Нам осталось обсудить поведение фазового угла, определяемого соотношением (27.3). Несложные тригонометрические преобразо-



Фиг. 13. Резонансный уровень.
Зависимость амплитуды волновой функции от энергии.

вания дают

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{\Omega}{k} \frac{1 - \cos 2ka}{1 + \frac{\Omega}{k} \sin 2ka}. \quad (27.14)$$

Если отношение Ω/k велико, то мы, как правило, можем пренебречь единицей в знаменателе, так что выражение (27.14) становится не зависящим от Ω :

$$\operatorname{tg} \delta \approx -\frac{1 - \cos 2ka}{\sin 2ka} = -\operatorname{tg} ka.$$

Это снова соответствует случаю непроницаемой стенки с волновой функцией

$$u(x) = \sin k(x-a)$$

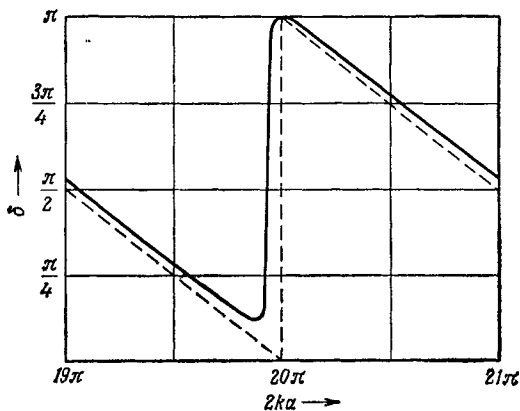
при $x > a$. Такое приближение неприменимо лишь для тех значений k , которые близки к корням уравнения

$$\sin 2ka = -\frac{k}{\Omega}. \quad (27.15)$$

Имеется два типа решений уравнения (27.15): когда $2ka$ немного больше $(2n+1)\pi$ и когда $2ka$ немного меньше $2n\pi$. В первом случае числитель $1 - \cos 2ka$ близок к 2 и почти постоянен. Но тогда $\operatorname{tg} \delta$ обращается в бесконечность, т. е. δ становится полуцелым кратным π , для определенности, скажем, $\pi/2$. В этой области фазовая кривая имеет постоянный наклон и в ее поведении не наблюдается сколько-нибудь существенных особенностей. С другой стороны, если $2ka$ лежит вблизи $2n\pi$, то числитель равен нулю, причем этот нуль, хотя и лежит вблизи, но не совпадает с нулем знаменателя, положение которого определяется уравнением (27.15), поэтому $\operatorname{tg} \delta$ внутри очень узкого интервала изменений переменной $2ka$ пробегает значения от бесконечности до нуля, а фазовый угол δ — от $\pi/2$ до π . Выше мы видели, что в областях, близких к точкам $2ka = 2n\pi$, имеются резонансы, а скачкообразное изменение фазы при прохождении через резонанс является характерной особенностью колебательных систем.

На фиг. 14 показано изменение фазового угла в том же интервале значений $2ka$, который приведен на фиг. 13. Если бы величина Ω была бесконечно большой, то поведение фазового угла описывалось бы пунктирной кривой. При построении этой кривой мы для удобства в точке $2ka = 20\pi$ произвольно добавили скачок фазы, равный π , что влечет за собой скачкообразное изменение знака волновой функции, который сам по себе, как известно, не имеет физического смысла. Для выбранного нами конечного значения Ω поведение фазового угла показано на фиг. 14 сплошной кривой. Согласно этой кривой, для последовательных значений энергии мы получаем набор волновых функций, которые по фазе не слишком отличаются от волновых

функций, соответствующих непроницаемой стенке, но которые тем не менее непрерывным образом переходят друг в друга при прохождении через резонансное значение энергии, так что в этом случае скачок фазы приобретает реальное значение.



Фиг. 14. Резонансный уровень.
Зависимость фазового угла от энергии.

Задача 28. Периодический потенциал

Получить общие соотношения для волновых функций и энергетического спектра в случае периодического потенциала.

Решение. Если $V(x)$ — периодическая функция с периодом a , то уравнение Шредингера инвариантно по отношению ко всем трансляциям, кратным a :

$$V(x+a) = V(x), \quad x \rightarrow x+na, \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (28.1)$$

Обозначим через $u_1(x)$ и $u_2(x)$ два линейно независимых решения уравнения Шредингера, тогда функции $u_1(x+a)$ и $u_2(x+a)$ также должны быть решениями этого уравнения. Так как любое решение можно представить в виде линейной комбинации $u_1(x)$ и $u_2(x)$, то это должно быть справедливо и в отношении решений $u_1(x+a)$ и $u_2(x+a)$:

$$\begin{aligned} u_1(x+a) &= C_{11}u_1(x) + C_{12}u_2(x), \\ u_2(x+a) &= C_{21}u_1(x) + C_{22}u_2(x). \end{aligned} \quad (28.2)$$

Теперь можно доказать (*теорема Флоке*), что среди этих решений имеются два, скажем ψ_1 и ψ_2 , таких, что

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x), \quad (28.3)$$

где множитель λ — постоянная. В этом случае, очевидно,

$$\psi(x+na) = \lambda^n\psi(x), \quad n=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (28.3a)$$

Искомое доказательство выглядит следующим образом:

$$\psi(x) = Au_1(x) + Bu_2(x), \quad (28.4)$$

и, согласно (28.2),

$$\psi(x+a) = (AC_{11} + BC_{21})u_1(x) + (AC_{12} + BC_{22})u_2(x).$$

Последнее же выражение равно $\lambda\psi(x)$, если

$$\begin{aligned} AC_{11} + BC_{21} &= \lambda A, \\ AC_{12} + BC_{22} &= \lambda B. \end{aligned} \quad (28.5)$$

Система (28.5) двух однородных линейных уравнений относительно A и B имеет нетривиальное решение тогда и только тогда, когда обращается в нуль детерминант:

$$\begin{vmatrix} C_{11} - \lambda & C_{21} \\ C_{12} & C_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (28.6)$$

Это — квадратное относительно λ уравнение, двум корням которого, λ_1 и λ_2 , соответствуют две функции, ψ_1 и ψ_2 .

Из формулы (28.3) можно усмотреть, что определитель Вронского

$$D = \psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1'$$

удовлетворяет соотношению

$$D(x+a) = \lambda_1\lambda_2 D(x).$$

По теореме Грина определитель Вронского D не зависит от x , отсюда следует, что

$$\lambda_1\lambda_2 = 1. \quad (28.7)$$

О параметрах λ_1 и λ_2 можно получить более подробные сведения, рассмотрев равенство (28.3а). Пусть $|\lambda| > 1$, тогда амплитуда волновой функции ψ будет неограниченно возрастать при $x \rightarrow \infty$ и неограниченно убывать при $x \rightarrow -\infty$. Противоположный случай имеет место, если $|\lambda| < 1$. Такие решения не нормируемы даже в том смысле, который мы вкладываем в это понятие в случае плоских волн, поэтому физически значимые решения существуют лишь при $|\lambda| = 1$, т. е. когда

$$\lambda_1 = e^{iKa} \quad \text{и} \quad \lambda_2 = e^{-iKa}, \quad (28.8)$$

a и K — действительная величина. Так как $e^{2\pi i n} = 1$, то можно ограничиться теми значениями K , которые лежат в интервале

$$-\frac{\pi}{a} \leq K \leq \frac{\pi}{a}, \quad (28.9)$$

что даст нам полный набор всех допустимых волновых функций. Таким образом, для всех ограниченных решений $\psi(x)$ имеем

$$\psi(x+na) = e^{inKa}\psi(x). \quad (28.10)$$

Последнее возможно лишь в том случае, если

$$\psi(x) = e^{iKx} u_K(x), \quad (28.11)$$

а $u_K(x)$ — периодическая функция, т. е.

$$u_K(x) = u_K(x+a). \quad (28.12)$$

Этот результат составляет содержание *теоремы Блоха*.

Обратимся теперь к вопросу об энергетическом спектре. В интервале $0 \leq x \leq a$ построим решение ψ из двух каких-либо решений u_1 и u_2 , так же, как это сделано в (28.4). Для соседнего интервала периодичности $a \leq x \leq 2a$ в соответствии с формулой (28.10) получаем

$$\psi(x) = e^{iKa} [Au_1(x-a) + Bu_2(x-a)], \quad (28.13)$$

причем значения аргумента $x-a$ попадают в предыдущий интервал. На границе этих интервалов, в точке $x=a$, должны совпадать как сами выражения (28.4) и (28.13), так и их производные:

$$\begin{aligned} Au_1(a) + Bu_2(a) &= e^{iKa} [Au_1(0) + Bu_2(0)], \\ Au_1'(a) + Bu_2'(a) &= e^{iKa} [Au_1'(0) + Bu_2'(0)]. \end{aligned} \quad (28.14)$$

Эта однородная относительно A и B система уравнений разрешима в том и только в том случае, если обращается в нуль детерминант:

$$\begin{vmatrix} u_1(a) - e^{iKa}u_1(0) & u_2(a) - e^{iKa}u_2(0) \\ u_1'(a) - e^{iKa}u_1'(0) & u_2'(a) - e^{iKa}u_2'(0) \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрывая детерминант, окончательно приходим к соотношению

$$\cos Ka = \frac{[u_1(0)u_2'(a) + u_1(a)u_2'(0)] - [u_2(0)u_1'(a) + u_2(a)u_1'(0)]}{2(u_1u_2' - u_2u_1')}. \quad (28.15)$$

Здесь в знаменателе стоит вронскиан, взятый для любого значения аргумента (так как вронскиан есть константа, то нет необходимости указывать его конкретное значение).

Уравнение (28.15) представляет собой условие существования собственных значений. Оно разрешимо только в том случае, если абсолютная величина правой части не превышает единицы, тогда с помощью этого уравнения можно вычислить величину K . Имеются целые интервалы значений энергии, удовлетворяющие указанному условию, и чередующиеся с ними интервалы значений энергии, для которых это условие не выполняется. Таким образом, энергетический спектр состоит не из отдельных уровней, а представляет собой чередующиеся последовательности разрешенных и запрещенных *энергетических зон*. Границы энергетических зон определяются согласно (28.15) из соотношения $\cos Ka = \pm 1$.

Замечание. Так как функции u_1 и u_2 можно заменить любой другой парой линейно независимых решений v_1 и v_2 , то уравнение (28.15) с таким же

успехом можно записать через функции v . Оно, однако, должно приводить к тем же самым энергетическим зонам. В этом нетрудно убедиться, подставив выражения

$$u_1 = c_{11}v_1 + c_{12}v_2, \quad u_2 = c_{21}v_1 + c_{22}v_2$$

в уравнение (28.15). Несложные выкладки показывают, что при использовании функций v получается в точности то же самое выражение, что и при использовании функций u , если детерминант $\|c_{ik}\|$ не обращается в нуль.

Задача 29. Дираковская потенциальная гребенка

Дан периодический потенциал, образованный последовательностью δ -функций Дирака (интервал между соседними особыми точками постоянен и равен a):

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{m} \Omega \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (29.1)$$

Определить зоны разрешенных значений энергии.

Решение. Начнем с фундаментальных решений

$$u_1(x) = e^{ikx} \quad \text{и} \quad u_2(x) = e^{-ikx}. \quad (29.2)$$

Если

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (29.3)$$

— решение в интервале $0 \leq x \leq a$, ограниченное в смысле задачи 28, то в соседнем интервале $a \leq x \leq 2a$ будем иметь

$$u(x) = e^{iKa} [Ae^{ik(x-a)} + Be^{-ik(x-a)}]. \quad (29.4)$$

Далее при $x = a$ должны выполняться граничные условия

$$\begin{aligned} u(a+0) &= u(a-0), \\ u'(a+0) &= u'(a-0) + 2\Omega u(a), \end{aligned} \quad (29.5)$$

поэтому

$$e^{iKa} (A + B) = Ae^{ika} + Be^{-ika} \quad (29.6a)$$

и

$$ike^{iKa} (A - B) = ik (Ae^{ika} - Be^{-ika}) + 2\Omega (Ae^{ika} + Be^{-ika}). \quad (29.6b)$$

Уравнения (29.6a) и (29.6b) представляют собой однородную систему линейных уравнений относительно A и B — ее детерминант должен обращаться в нуль. Тривиальные преобразования дают

$$\cos Ka = \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka. \quad (29.7)$$

Следовательно, зоны разрешенных значений энергии определяются неравенством

$$\left| \cos ka + \frac{\Omega}{k} \sin ka \right| \leq 1, \quad (29.8)$$

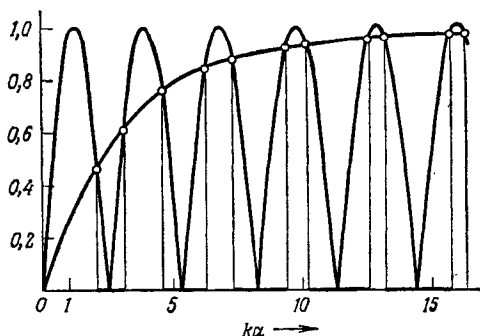
или

$$\left| \cos \left(ka - \operatorname{arctg} \frac{\Omega a}{ka} \right) \right| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + (\Omega a/ka)^2}}, \quad (29.9)$$

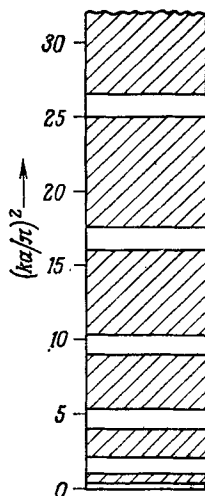
а собственные значения энергии равны

$$E = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (ka)^2. \quad (29.10)$$

На фиг. 15—18 приведены результаты расчетов для случая $\Omega a = 4$. Функции переменной ka , стоящие в правой и левой частях неравенства (29.9), показаны на фиг. 15. Точки пересечения соответствующих кривых изображены кружками, а интервалы, в которых выполняется неравенство (29.9), отмечены на оси ka жирными линиями. Верхним границам зон соответствуют точки,



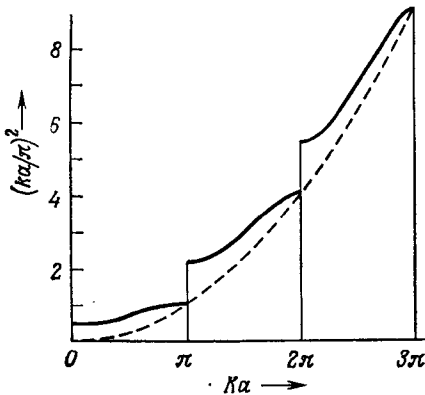
Фиг. 15. Графическое определение зонной структуры.



Фиг. 16. Зонная структура в случае дираковской потенциальной гребенки.

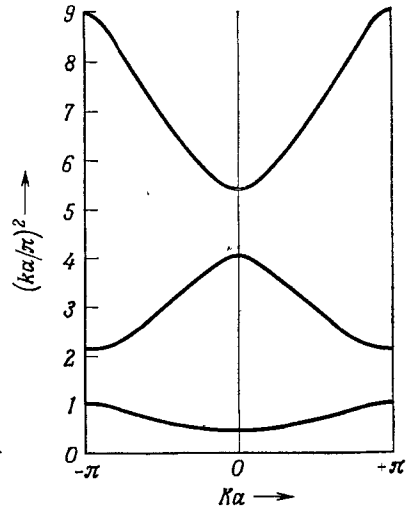
кратные π ; согласно уравнению (29.7), в этих точках $\cos Ka = \cos ka$. Положение зон на энергетической шкале, найденное с помощью фиг. 15, показано на фиг. 16, где разрешенные энергетические зоны заштрихованы. По мере роста энергии разрешенные зоны расширяются, так что энергетический спектр приближается к непрерывному. Тем не менее он никогда полностью не совпадает с ним: даже при самых высоких энергиях всегда имеются запрещенные зоны, примыкающие сверху к точкам $ka = n\pi$. На фиг. 17 и 18 показана зависимость энергии (в безразмерных единицах) от переменной Ka для первых трех зон. На фиг. 17 переменная Ka монотонно возрастает от зоны к зоне, а на фиг. 18 ее изменение ограничено интервалом $-\pi \leq Ka \leq \pi$. Пунктирная кривая на фиг. 17 представляет собой параболу $K = k$, проходящую через точки, соответствующие верхним границам разрешенных зон.

Все приведенные фигуры относятся к случаю $\Omega a = 4$, поэтому по ним нельзя судить о влиянии проницаемости стенки на энергетический спектр. Для меньших значений Ωa правая часть неравенства (29.9) будет быстрее приближаться к единице, и соответствующая кривая на фиг. 15 будет пересекать косинусоиду в точках, более близких к максимумам последней. Это,



Фиг. 17. Зависимость энергии от переменной ka для трех первых зон (одномерные зоны Бриллюэна).

Пунктирная кривая — парабола, отвечающая энергии свободной частицы.



Фиг. 18. Зависимость энергии от переменной ka .

Приведенное представление.

разумеется, означает, что запрещенные зоны станут уже. Так как положения верхних границ разрешенных зон (точки $ka = n\pi$) не зависят от Ωa , то по мере уменьшения этой величины будут смещаться вниз на фиг. 16 лишь одни нижние границы этих зон. При $\Omega a = 0$ запрещенные зоны исчезают, но при этом исчезает и наш потенциал, и мы приходим к случаю свободного движения, которому соответствует непрерывный спектр. С другой стороны, если $\Omega a \rightarrow \infty$, то разрешенные зоны вырождаются в дискретные уровни $ka = n\pi$. В этом случае стенки полностью изолируют потенциальные ямы друг от друга и рассматриваемый спектр сводится к спектру задачи 18, только теперь расстояние между стенками равно a , в задаче же 18 оно равнялось $2a$.

Литература

Kronig R. de L., Penney W., Proc. Roy. Soc., 130, 499 (1931).

Задача 30. Гармонический осциллятор

Найти собственные значения и собственные функции в случае осцилляторного потенциала

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (30.1)$$

Решение. Введя обозначения

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{и} \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}, \quad (30.2)$$

уравнение Шредингера можно записать в виде

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + (k^2 - \lambda^2 x^2) u = 0. \quad (30.3)$$

Решения этого дифференциального уравнения асимптотически при $|x| \gg k/\lambda$ ведут себя как $\exp(\pm 1/2 \lambda x^2)$. Если выделить эту экспоненту из функции $u(x)$, положив

$$u(x) = e^{-1/2 \lambda x^2} v(x), \quad (30.4)$$

то функция $v(x)$, удовлетворяющая уравнению

$$v'' - 2\lambda x v' + (k^2 - \lambda) v = 0, \quad (30.5)$$

будет либо полиномом, либо пропорциональна $e^{\lambda x^2}$. Решая уравнение (30.5) с помощью разложения в ряд

$$v(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j, \quad (30.6)$$

получаем рекуррентное соотношение

$$a_{j+2} = \frac{\lambda(2j+1) - k^2}{(j+2)(j+1)} a_j. \quad (30.7)$$

При $j \rightarrow \infty$ имеет место асимптотическое соотношение $a_{j+2} = (2\lambda/j) a_j$, соответствующее степенному разложению функции $e^{\lambda x^2}$. Таким образом, решение (30.4) нельзя нормировать, если ряд (30.6) не обрывается на конечном члене, что происходит при условии $a_{n+2} = 0$, т. е. когда

$$k^2 = \lambda(2n+1).$$

В этом случае, согласно (30.2), имеем

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (30.8)$$

Собственные функции $u_n(x)$ можно определить с помощью соотношения (30.7) и нормировать их в соответствии с условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_n^2(x) dx = 1. \quad (30.9)$$

Несколько первых собственных функций приводятся ниже:

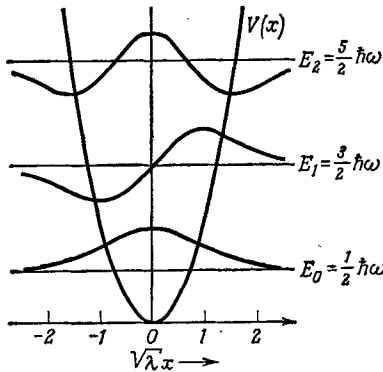
$$\begin{aligned}
 u_0 &= C_0 e^{-1/2 \lambda x^2}, \\
 u_1 &= C_1 x e^{-1/2 \lambda x^2}, \\
 u_2 &= C_2 (1 - 2\lambda x^2) e^{-1/2 \lambda x^2}, \\
 u_3 &= C_3 \left(x - \frac{2}{3} \lambda x^3 \right) e^{-1/2 \lambda x^2}, \\
 u_4 &= C_4 \left(1 - 4\lambda x^2 + \frac{4}{3} \lambda^2 x^4 \right) e^{-1/2 \lambda x^2}, \\
 u_5 &= C_5 \left(x - \frac{4}{3} \lambda x^3 + \frac{4}{15} \lambda^2 x^5 \right) e^{-1/2 \lambda x^2},
 \end{aligned} \tag{30.10}$$

а соответствующие нормировочные постоянные равны

$$\begin{aligned}
 C_n &= \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{1/4} c_n, \quad c_0 = 1, \quad c_1 = \sqrt{2\lambda}, \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\
 c_3 &= \sqrt{3\lambda}, \quad c_4 = \sqrt{\frac{3}{8}}, \quad c_5 = \sqrt{\frac{15\lambda}{4}}.
 \end{aligned} \tag{30.11}$$

Три первые собственные функции показаны на фиг. 19.

Легко видеть, что собственные функции обладают определенной четностью. В самом деле, в силу симметрии потенциала, $V(-x) = V(x)$, функция $u_n(-x)$ является решением дифференциального уравнения наряду с функцией $u_n(x)$ и принадлежит тому же самому собственному значению (30.8). Так как вырождение отсутствует, то оба решения могут различаться лишь постоянным множителем f , причем в силу условия нормировки $|f|^2 = 1$. При повторном изменении знака x мы возвращаемся к исходному решению, поэтому $f^2 = 1$ или $f = \pm 1$, следовательно, всякая собственная функция должна быть либо четной, либо нечетной.



Фиг. 19. Потенциал, энергетические уровни и собственные функции гармонического осциллятора.

Этот факт можно подтвердить непосредственно, если в уравнение (30.5) ввести вместо x новую переменную

$$y = \lambda x^2, \tag{30.12}$$

тогда $v(y)$ будет удовлетворять дифференциальному уравнению для вырожденной гипергеометрической функции:

$$y v'' + \left(\frac{1}{2} - y \right) v' + \left(\frac{k^2}{4\lambda} - \frac{1}{4} \right) v = 0.$$

Если положить

$$a = \frac{1}{4} - \frac{k^2}{4\lambda} = \frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}, \quad (30.13)$$

то общее решение этого уравнения будет иметь вид

$$v = A {}_1F_1\left(a, \frac{1}{2}; y\right) + B y^{1/2} {}_1F_1\left(a + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; y\right). \quad (30.14)$$

Так как вырожденный гипергеометрический ряд ${}_1F_1$ есть целая функция, то первое слагаемое в решении (30.14) четное, а второе нечетное по отношению к переменной x . При $y \rightarrow \infty$ оба слагаемых расходятся как $e^y y^{a-1/2}$ и решение u нельзя нормировать, если ряды не исчезают и не обрываются. Гипергеометрический ряд обрывается только тогда, когда его первый аргумент равен целому отрицательному числу, поэтому у нас имеется две возможности. Если

$$a = -n, \text{ или } E_{2n} = \hbar\omega\left(2n + \frac{1}{2}\right), \quad (30.15a)$$

то обрывается первый ряд и для собственной функции получаем

$$u_{2n}(x) = A {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) e^{-1/2\lambda x^2}. \quad (30.16a)$$

Если же

$$a + \frac{1}{2} = -n, \text{ или } E_{2n+1} = \hbar\omega\left(2n + \frac{3}{2}\right), \quad (30.15b)$$

то обрывается второй ряд и собственная функция будет равна

$$u_{2n+1}(x) = B x {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right) e^{-1/2\lambda x^2}. \quad (30.16b)$$

Эти результаты полностью согласуются с формулой для собственных значений (30.8) и собственными функциями (30.10).

Многочлены, определяемые равенствами (30.16a) и (30.16b), называются *полиномами Эрмита*. С вырожденной гипергеометрической функцией они связаны соотношениями:

$$\begin{aligned} H_{2n}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \xi^2\right), \\ H_{2n+1}(\xi) &= (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2\xi {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \xi^2\right). \end{aligned} \quad (30.17)$$

Кроме того, имеет место формула

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (30.18)$$

Таким образом, в общем случае нормированные собственные функции [см. (30.9)] имеют вид

$$u_n(x) = \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\right)^{1/2} H_n(\sqrt{\lambda} x) e^{-1/2\lambda x^2}. \quad (30.19)$$

Для вычисления нормировки в формуле (30.19) можно воспользоваться следующим приемом. Запишем собственную функцию в виде

$$u_n = C_n e^{-1/2 \xi^2} H_n(\xi); \quad \xi = \sqrt{\lambda} x,$$

тогда в силу условия (30.9) должно быть

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} [H_n(\xi)]^2 d\xi = \sqrt{\lambda}.$$

Заменяем теперь один из полиномов $H_n(\xi)$ его выражением (30.18). Беря получающийся интеграл

$$(-1)^n C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = \sqrt{\lambda}$$

n раз по частям, окончательно находим

$$C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi = \sqrt{\lambda}.$$

Поскольку $H_n(\xi)$ — многочлен n -й степени относительно ξ , то после n -кратного дифференцирования останется вклад лишь от высшей степени ξ :

$$H_n(\xi) = (2\xi)^n + \dots,$$

т. е.

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n!$$

и

$$C_n^2 \cdot 2^n n! \sqrt{\pi} = \sqrt{\lambda}$$

в полном согласии с формулой (30.19).

Задача 31. Осциллятор в абстрактном гильбертовом пространстве (осциллятор в представлении Фока)

Используя операторы

$$b = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p - i\omega m x), \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (p + i\omega m x), \quad (31.1)$$

найти собственные значения энергии гармонического осциллятора и построить соответствующие им собственные векторы, не конкретизируя абстрактное гильбертово пространство состояний.

Решение. Подставляя оператор b и эрмитово сопряженный ему оператор b^\dagger в гамильтониан

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad (31.2)$$

получаем

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (bb^\dagger + b^\dagger b). \quad (31.3)$$

Легко видеть далее, что из канонического перестановочного соотношения $px - xp = \hbar/i$ следует

$$bb^\dagger - b^\dagger b = 1. \quad (31.4)$$

Равенства (31.3) и (31.4) служат математической основой для построения гильбертова пространства состояний.

Предположим, что существует по крайней мере один кет-вектор $|\psi_\lambda\rangle$, принадлежащий собственному значению λ оператора $b^\dagger b$:

$$b^\dagger b |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle; \quad (31.5)$$

этот вектор будем предполагать нормированным:

$$\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle = 1. \quad (31.6)$$

Если теперь умножить равенство (31.5) на бра-вектор $\langle \psi_\lambda |$, то левую часть получающегося равенства

$$\langle \psi_\lambda | b^\dagger b | \psi_\lambda \rangle = \lambda$$

можно преобразовать, воспользовавшись определением эрмитово сопряженного оператора

$$\langle \chi | L^\dagger | \varphi \rangle = \langle L \chi | \varphi \rangle.$$

В результате найдем

$$\langle b \psi_\lambda | b \psi_\lambda \rangle = \lambda. \quad (31.7)$$

Таким образом, величина λ , будучи квадратом нормы вектора $|b\psi_\lambda\rangle$, должна быть действительной и положительной:

$$\lambda \geq 0, \quad (31.8)$$

причем $\lambda = 0$ только тогда, когда $b|\psi_\lambda\rangle = 0$. Все это справедливо для любого собственного значения, так как в нашем распоряжении пока еще нет способа отличить одно собственное значение от другого.

Собственное значение, отличное от λ , можно найти, умножив равенство (31.5) слева на b и перегруппировав затем сомножители с учетом закона ассоциативности и перестановочного соотношения (31.4):

$$b(b^\dagger b) = (bb^\dagger)b = (b^\dagger b + 1)b.$$

Таким образом,

$$(b^\dagger b + 1)b|\psi_\lambda\rangle = \lambda b|\psi_\lambda\rangle,$$

или

$$(b^\dagger b)|b\psi_\lambda\rangle = (\lambda - 1)|b\psi_\lambda\rangle.$$

Поэтому кет-вектор $|b\psi_\lambda\rangle$ является собственным вектором оператора $b^\dagger b$ и принадлежит собственному значению $\lambda - 1$. Этот вектор пока еще не нормирован, но, как показывает равенство (31.7),

нормированный собственный вектор должен иметь вид

$$|\psi_{\lambda-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} b |\psi_{\lambda}\rangle. \quad (31.9)$$

Такую процедуру можно повторить, и мы получаем убывающую последовательность собственных значений, причем

$$|\psi_{\lambda-n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\dots(\lambda-n+1)}} b^n |\psi_{\lambda}\rangle. \quad (31.10)$$

Для всех $n > \lambda$ эти собственные значения отрицательны, что противоречит неравенству (31.8). Противоречие не возникает только в том случае, если собственные значения целочисленные, так как при этом последовательность (31.10) обрывается на векторе $|\psi_0\rangle$ ввиду того, что, согласно (31.9), $b|\psi_0\rangle = 0$.

Возрастающую последовательность собственных значений можно построить путем повторного умножения на оператор b^\dagger . Так как

$$b^\dagger(b^\dagger b) = b^\dagger(bb^\dagger - 1) = (b^\dagger b) b^\dagger - b^\dagger,$$

то из равенства (31.5) следует

$$(b^\dagger b) |b^\dagger \psi_{\lambda}\rangle = (\lambda + 1) |b^\dagger \psi_{\lambda}\rangle.$$

Здесь снова вектор $|b^\dagger \psi_{\lambda}\rangle$ еще не нормирован:

$$\langle b^\dagger \psi_{\lambda} | b^\dagger \psi_{\lambda} \rangle = \langle b b^\dagger \psi_{\lambda} | \psi_{\lambda} \rangle = \langle (1 + b^\dagger b) \psi_{\lambda} | \psi_{\lambda} \rangle = \lambda + 1.$$

Следовательно,

$$|\psi_{\lambda+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda+1}} |b^\dagger \psi_{\lambda}\rangle \quad (31.11)$$

и

$$|\psi_{\lambda+n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(\lambda+1)(\lambda+2)\dots(\lambda+n)}} b^{n\dagger} |\psi_{\lambda}\rangle. \quad (31.12)$$

Подытожим теперь наши результаты. Собственными значениями оператора $b^\dagger b$ являются целые числа $n = 0, 1, 2, \dots$. Оператор $b b^\dagger$, как следует из соотношения (31.4), имеет ту же систему собственных векторов, но его собственные значения равны $n + 1$. Следовательно, для гамильтониана (31.3) справедливо соотношение

$$H |\psi_n\rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega (2n + 1) |\psi_n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (31.13)$$

Отсюда для энергии осциллятора получаются хорошо известные значения, найденные нами с помощью координатного представления в задаче 30.

Векторы состояний $|\psi_n\rangle$ не являются собственными векторами операторов b и b^\dagger , однако матрицы этих операторов можно легко построить, взяв векторы $|\psi_n\rangle$ в качестве координатных векторов гильбертова пространства.

С помощью формул (31.9) и (31.11) соответственно находим

$$\langle \psi_{n-1} | b | \psi_n \rangle = \sqrt{n} \quad (31.14)$$

и

$$\langle \psi_{n+1} | b^\dagger | \psi_n \rangle = \sqrt{n+1}. \quad (31.15)$$

Все другие матричные элементы исчезают благодаря ортогональности векторов $|\psi_n\rangle$. В этом нетрудно убедиться непосредственной проверкой:

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | b^\dagger b \psi_n \rangle &= n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \langle b \psi_m | b \psi_n \rangle, \\ \langle b^\dagger b \psi_m | \psi_n \rangle &= m \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \langle b \psi_m | b \psi_n \rangle, \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$(n-m) \langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0,$$

поэтому либо $n = m$, либо $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = 0$. Матрицы (31.14) и (31.15) можно записать следующим образом:

$$b = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad b^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (31.16)$$

Литература

Becker R., Leibfried G., Zs. Phys., 125, 347 (1949).

Задача 32. Использование лестничных операторов для нахождения собственных функций осциллятора

Найти собственные функции осциллятора, переведя операторы b и b^\dagger предыдущей задачи на язык координатного представления.

Решение. Введенные с помощью соотношений (31.1) операторы b и b^\dagger являются линейной комбинацией операторов p и x . В координатном представлении x — классическая переменная, а

$$p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (32.1)$$

— дифференциальный оператор. Здесь удобно выбрать в качестве единицы длины величину

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (32.2)$$

и во всех соотношениях пользоваться безразмерной переменной

$$\xi = \frac{x}{l} \quad (32.3)$$

вместо переменной x . При этом имеем

$$b = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right), \quad b^\dagger = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right). \quad (32.4)$$

Наинищее состояние, согласно результатам предыдущей задачи, определяется соотношением $b\psi_0 = 0$ или

$$\left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \psi_0(\xi) = 0. \quad (32.5)$$

Это есть дифференциальное уравнение с общим решением

$$\psi_0 = C_0 e^{-1/2 \xi^2},$$

где постоянную интегрирования следует выбрать, руководствуясь соображениями нормировки так, чтобы

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2 dx = l \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(\xi) d\xi = 1.$$

Таким образом, получаем

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} l^{-1/2} e^{-1/2 \xi^2}. \quad (32.6)$$

Полный набор собственных функций теперь можно построить, применяя последовательно оператор b^\dagger :

$$\psi_{n+1} = \frac{i}{\sqrt{2(n+1)}} \left(-\frac{d}{d\xi} + \xi \right) \psi_n, \quad (32.7)$$

т. е. путем повторного дифференцирования формулы (32.6). Если мы напишем

$$\psi_n = C_n H_n(\xi) e^{-1/2 \xi^2}, \quad (32.8)$$

то тогда в соответствии с (32.7) функции $H_n(\xi)$ будут многочленами n -й степени от ξ , причем для них должно выполняться рекуррентное соотношение

$$C_{n+1} H_{n+1} = -\frac{i}{\sqrt{2(n+1)}} C_n (H'_n - 2\xi H_n). \quad (32.9)$$

Если мы выберем нормировочные постоянные таким образом, чтобы

$$C_{n+1} = \frac{i}{\sqrt{2(n+1)}} C_n, \quad (32.10)$$

то тогда формула (32.9) просто превратится в рекуррентное соотношение для полиномов Эрмита:

$$H_{n+1} = -(H'_n - 2\xi H_n),$$

где

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

Сравнение с формулой (30.19) показывает, что полученный там нормировочный множитель, если отвлечься от i , удовлетворяет соотношению (32.10), поэтому

$$C_n = \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \right)^{1/2} \quad \text{и} \quad \lambda = \frac{1}{l^2}.$$

Множитель i , разумеется, произволен, так как условие нормировки оставляет фазовый множитель всякой собственной функции неопределенным.

Задача 33. Гармонический осциллятор в матричном представлении

Получить матрицы p_{mn} и x_{mn} для импульса p и координаты x гармонического осциллятора, определяемого гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2M} p^2 + \frac{M\omega^2}{2} x^2, \quad (33.1)$$

в представлении, где оператор H диагонален. Чему равны соответствующие собственные значения?

Решение. Отправной точкой для нас послужит диагональность гамильтониана

$$H_{mn} = \frac{1}{2M} \sum_k p_{mk} p_{kn} + \frac{M\omega^2}{2} \sum_k x_{mk} x_{kn} = E_n \delta_{mn}, \quad (33.2)$$

где E_n — собственные значения. Кроме того, у нас имеются (см. задачу 8) соотношения

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{i}{\hbar} (Hp - pH), \quad \frac{\partial H}{\partial p} = +\frac{i}{\hbar} (Hx - xH), \quad (33.3)$$

которые в матричных обозначениях с учетом равенств $\partial H / \partial x = M\omega^2 x$ и $\partial H / \partial p = p/M$ можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} M\omega^2 x_{mn} &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} p_{kn} - p_{mk} H_{kn}), \\ \frac{1}{M} p_{mn} &= +\frac{i}{\hbar} \sum_k (H_{mk} x_{kn} - x_{mk} H_{kn}). \end{aligned}$$

С помощью формулы (33.2) они легко приводятся к виду

$$\begin{aligned} M\omega^2 x_{mn} &= -\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) p_{mn}, \\ \frac{1}{M} p_{mn} &= +\frac{i}{\hbar} (E_m - E_n) x_{mn}. \end{aligned} \quad (33.4)$$

Эта система однородных уравнений относительно x_{mn} и p_{mn} будет совместной, если исчезают оба матричных элемента или

если ее определитель равен нулю; в последнем случае

$$(E_m - E_n)^2 = (\hbar\omega)^2. \quad (33.5)$$

Упорядочив собственные значения в соответствии с неравенствами

$$\dots < E_1 < E_2 < E_3 < \dots,$$

мы получаем, что разность двух последовательных собственных значений равна $\hbar\omega$ и что

$$E_n = \hbar\omega(n + \varepsilon), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (33.6)$$

где ε — постоянная, общая для всех собственных значений. Но тогда единственными, не равными нулю матричными элементами будут элементы $p_{n, n \pm 1}$ и $x_{n, n \pm 1}$, которые в силу (33.4) должны удовлетворять соотношению

$$p_{n, n \pm 1} = \mp iM\omega x_{n, n \pm 1}. \quad (33.7)$$

Теперь попытаемся получить более подробную информацию о нашем гамильтониане. Начнем с матриц p^2 и x^2 . Согласно соотношению (33.7), имеем

$$(p^2)_{nk} = p_{n, n+1}p_{n+1, k} + p_{n, n-1}p_{n-1, k},$$

где только при $k = n, n + 2, n - 2$ левая часть не обращается в нуль. Аналогичное соотношение имеет место и для матричных элементов x^2 . Подставляя их в формулу (33.2), для недиагональных элементов гамильтониана получаем

$$\begin{aligned} H_{n, n+2} &= \frac{1}{2M} p_{n, n+1}p_{n+1, n+2} + \frac{M\omega^2}{2} x_{n, n+1}x_{n+1, n+2} = \\ &= x_{n, n+1}x_{n+1, n+2} \left[-\frac{1}{2M} M^2\omega^2 + \frac{M\omega^2}{2} \right] = 0. \end{aligned}$$

То же самое справедливо и для матричных элементов $H_{n, n-2}$, что полностью согласуется с фактом диагональности оператора H , послужившим основой вывода уравнений (33.4). Что касается диагональных матричных элементов, то они имеют вид

$$\begin{aligned} E_n &= \frac{1}{2M} (p_{n, n+1}p_{n+1, n} + p_{n, n-1}p_{n-1, n}) + \\ &+ \frac{M\omega^2}{2} (x_{n, n+1}x_{n+1, n} + x_{n, n-1}x_{n-1, n}). \end{aligned}$$

Согласно соотношению (33.7), слагаемые в правой части равны между собой, поэтому

$$E_n = M\omega^2 (x_{n, n+1}x_{n+1, n} + x_{n, n-1}x_{n-1, n}). \quad (33.8)$$

Равенства (33.8) и (33.6) устанавливают соотношение между матричными элементами оператора x . Учет эрмитовости оператора x дает еще одно соотношение

$$x_{n \pm 1, n} = x_{n, n \pm 1}^*. \quad (33.9)$$

Таким образом, получаем

$$\hbar\omega (n + \varepsilon) = M\omega^2 (|x_{n, n+1}|^2 + |x_{n-1, n}|^2). \quad (33.10)$$

Вводя обозначение

$$\frac{M\omega}{\hbar} |x_{n-1, n}|^2 = f(n), \quad (33.11)$$

последнее уравнение можно записать в виде

$$n + \varepsilon = f(n + 1) + f(n).$$

Решением этого функционального уравнения является функция

$$f(n) = \frac{1}{2} \left(n + \varepsilon - \frac{1}{2} \right), \quad (33.12)$$

в чем нетрудно убедиться, представив $f(n)$ в виде ряда по степеням n . Из соотношения (33.11) далее следует

$$x_{n, n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega} \left(n + \varepsilon + \frac{1}{2} \right)}. \quad (33.13)$$

Теперь у нас есть все необходимое, чтобы определить постоянную ε . Правая часть равенства (33.10) не может быть отрицательной, следовательно, не отрицательно и собственное значение, стоящее в левой части этого равенства. Предположим, что $n = 0$ есть наименьшее значение n , тогда матричный элемент

$$x_{-1, 0} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega} \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right)} \quad (33.14)$$

должен обратиться в нуль. Не будь этого, равенство (33.10) можно было бы использовать в качестве рекуррентного соотношения для вычисления матричных элементов $x_{n-1, n}$ вплоть до $n = -\infty$, что противоречило бы неравенству $n + \varepsilon > 0$. Приравняв нулю матричный элемент (33.14), находим искомую постоянную ε

$$\varepsilon = \frac{1}{2}, \quad (33.15)$$

а тем самым и собственные значения (33.6),

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (33.16)$$

так же, как и матричные элементы x , которые, согласно (33.9) и (33.13), равны

$$x_{n, n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega} (n + 1)} \quad \text{и} \quad x_{n, n-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega} n}. \quad (33.17)$$

Задача 34. Волновые функции осциллятора в пространстве импульсов

Определить волновые функции осциллятора в пространстве импульсов.

Решение. Очевидно, что у потенциала

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (34.1)$$

не существует фурье-образа, поэтому нельзя воспользоваться интегральным уравнением (14.6). Вместо этого нам придется вернуться к исходным определениям:

$$u(x) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(k) dk, \quad (34.2)$$

$$f(k) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} u(x) dx. \quad (34.3)$$

Подставив выражение (34.2) в уравнение Шредингера

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) u = 0, \quad (34.4)$$

после дифференцирования

$$\frac{d^2u}{dx^2} = - (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 e^{ikx} f(k) dk,$$

и двукратного интегрирования по частям

$$x^2 u = - (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f''(k) dk$$

получаем

$$(2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \left[-k^2 f(k) + \frac{2mE}{\hbar^2} f(k) + \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 f''(k) \right] dk = 0. \quad (34.5)$$

Вводя обозначения

$$\lambda = \frac{m\omega}{\hbar}, \quad \mu = \frac{E}{\hbar\omega}, \quad (34.6)$$

которые уже использовались нами при рассмотрении осциллятора в задаче 30, убеждаемся, что уравнения (34.4) (координатное пространство) и (34.5) (импульсное пространство) по существу идентичны.

| Координатное пространство | Импульсное пространство |
|--|--|
| $u'' + (2\mu\lambda - \lambda^2 x^2) u = 0$ $\tilde{x} = \sqrt{\lambda} x$ $\frac{d^2 u}{d\tilde{x}^2} + (2\mu - \tilde{x}^2) u = 0$ | $f'' + \left(\frac{2\mu}{\lambda} - \frac{k^2}{\lambda^2} \right) f = 0$ $\tilde{k} = \frac{k}{\sqrt{\lambda}}$ $\frac{d^2 f}{d\tilde{k}^2} + (2\mu - \tilde{k}^2) f = 0$ |

Следовательно, с точностью до нормировки функция f зависит от \tilde{k} точно так же, как функция u зависит от \tilde{x} . Так как из условия

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

как было показано в конце задачи 14, следует

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(k)|^2 dk = 1,$$

то отсюда

$$u(x) = \lambda^{1/4} \tilde{u}(\tilde{x}), \quad f(k) = \lambda^{-1/4} \tilde{f}(\tilde{k}),$$

где \tilde{f} так же зависит от \tilde{k} , как \tilde{u} от \tilde{x} , а эта последняя функция была найдена в задаче 30.

Задача 35. Ангармонический осциллятор

Оценить энергетические уровни ангармонического осциллятора

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \varepsilon_1 \left(\frac{x}{l} \right)^3 + \varepsilon_2 \left(\frac{x}{l} \right)^4, \quad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (35.1)$$

в первом и втором порядке теории возмущений.

Решение. В первом порядке теории возмущений сдвиг уровней гармонического осциллятора с энергией

$$E_n^0 = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (35.2)$$

и нормированными собственными функциями

$$u_n^0(x) = (2^n n! l \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-1/2 \xi^2} H_n(\xi), \quad \xi = \frac{x}{l} \quad (35.3)$$

определяется диагональными матричными элементами энергии возмущения:

$$\Delta^{(1)}E_n = E_n - E_n^0 = \int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon_1 \xi^3 + \varepsilon_2 \xi^4) [u_n^0(x)]^2 dx. \quad (35.4)$$

Так как $[u_n^0]^2$ — четная функция x , то член $\varepsilon_1 \xi^3$ не дает вклада в первую поправку $\Delta^{(1)}E_n$. Таким образом, первая поправка равна

$$\Delta^{(1)}E_n = \varepsilon_2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 [u_n^0(\xi)]^2 dx$$

и ее можно вычислить тем же приемом, что и нормировочный интеграл: заменить один из полиномов Эрмита $H_n(\xi)$ в подынтегральном выражении, согласно формуле

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}, \quad (35.5)$$

и произвести n -кратное интегрирование по частям. В результате получим

$$\Delta^{(1)}E_n = \frac{\varepsilon_2}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (\xi^4 H_n(\xi)) d\xi.$$

Многочлен $(n+4)$ -й степени, который требуется продифференцировать n раз, начинается с членов

$$\xi^4 H_n(\xi) = 2^n \left[\xi^{n+4} - \frac{1}{2} \binom{n}{2} \xi^{n+2} + \frac{3}{4} \binom{n}{4} \xi^n + \dots \right], \quad (35.6)$$

поэтому

$$\frac{d^n}{d\xi^n} (\xi^4 H_n) = 2^n \left\{ \frac{(n+4)!}{4!} \xi^4 - \frac{1}{2} \binom{n}{2} \frac{(n+2)!}{2!} \xi^2 + \frac{3}{4} \binom{n}{4} n! \right\}.$$

Учитывая значения хорошо известных интегралов

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \xi^4 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}, \quad (35.7)$$

окончательно приходим к выражению

$$\Delta^{(1)}E_n = \frac{3}{4} \varepsilon_2 (2n^2 + 2n + 1). \quad (35.8)$$

Результат первого порядка теории возмущений можно качественно пояснить следующим образом. Малая добавка к потенциалу $\varepsilon_1 \xi^3$ вызывает небольшую асимметрию параболы $V(x)$, но еще не меняет для низко лежащих уровней ее ширины. Следовательно, движение осциллирующей массы происходит в области таких же размеров, что и в случае гармонического осциллятора, поэтому нет причин, которые вызывали бы изменение энергии. Добавоч-

ный же член $\varepsilon_2 \xi^4$ при $\varepsilon_2 > 0$ ($\varepsilon_2 < 0$) симметричным образом поднимает (опускает) обе ветви параболы, тем самым уменьшая (увеличивая) ширину параболы и размеры области движения даже для самых малых энергий, поэтому все энергетические уровни смещаются вверх (вниз) в согласии со знаком правой части формулы (35.8).

Во втором порядке теории возмущений к энергиям (35.2) и (35.8) мы должны добавить поправку

$$\Delta^{(2)} E_n = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n | \varepsilon_1 \xi^3 + \varepsilon_2 \xi^4 | m \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}. \quad (35.9)$$

Для осциллятора отличны от нуля только следующие недиагональные матричные элементы [они вычисляются тем же методом, который использовался при вычислении поправки (35.8)]:

$$\begin{aligned} \langle n | \xi^3 | n+1 \rangle &= 3 \left(\frac{n+1}{2} \right)^{3/2}, \\ \langle n | \xi^3 | n-1 \rangle &= 3 \left(\frac{n}{2} \right)^{3/2}, \\ \langle n | \xi^3 | n+3 \rangle &= \left[\frac{1}{8} (n+3)(n+2)(n+1) \right]^{1/2}, \\ \langle n | \xi^3 | n-3 \rangle &= \left[\frac{1}{8} n(n-1)(n-2) \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (35.10)$$

и

$$\begin{aligned} \langle n | \xi^4 | n+2 \rangle &= \sqrt{(n+2)(n+1)} \left(n + \frac{3}{2} \right), \\ \langle n | \xi^4 | n-2 \rangle &= \sqrt{n(n-1)} \left(n - \frac{1}{2} \right), \\ \langle n | \xi^4 | n+4 \rangle &= \frac{1}{4} \sqrt{(n+4)(n+3)(n+2)(n+1)}, \\ \langle n | \xi^4 | n-4 \rangle &= \frac{1}{4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}. \end{aligned} \quad (35.11)$$

С учетом значений этих матричных элементов общая формула (35.9) дает

$$\Delta^{(2)} E_n = -\frac{\varepsilon_1^2}{\hbar\omega} \cdot \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right) - \frac{\varepsilon_2^2}{\hbar\omega} \cdot \frac{1}{8} (34n^3 + 51n^2 + 59n + 21). \quad (35.12)$$

Если теперь ввести обозначения

$$\begin{aligned} A_n^{(2)} &= \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right), \\ B_n^{(1)} &= \frac{3}{4} (2n^2 + 2n + 1), \\ B_n^{(2)} &= \frac{1}{8} (34n^3 + 51n^2 + 59n + 21), \end{aligned} \quad (35.13)$$

то выражение для энергии с точностью до членов второго порядка включительно принимает вид

$$E_n = \hbar\omega \left\{ \left(n + \frac{1}{2} \right) - \left(\frac{\varepsilon_1}{\hbar\omega} \right)^2 A_n^{(2)} + \frac{\varepsilon_2}{\hbar\omega} B_n^{(1)} - \left(\frac{\varepsilon_2}{\hbar\omega} \right)^2 B_n^{(2)} \right\}. \quad (35.14)$$

Значения коэффициентов для четырех низших уровней приведены в таблице:

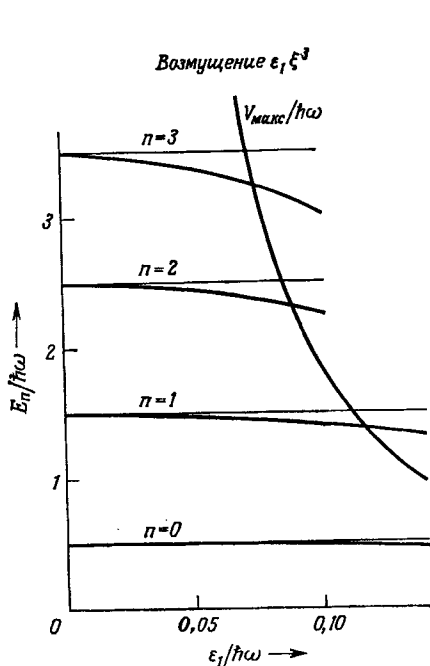
| n | $A_n^{(2)}$ | $B_n^{(1)}$ | $B_n^{(2)}$ |
|-----|-----------------|----------------|------------------|
| 0 | $\frac{11}{8}$ | $\frac{3}{4}$ | $\frac{21}{8}$ |
| 1 | $\frac{71}{8}$ | $\frac{15}{4}$ | $\frac{165}{8}$ |
| 2 | $\frac{191}{8}$ | $\frac{39}{4}$ | $\frac{615}{8}$ |
| 3 | $\frac{371}{8}$ | $\frac{75}{4}$ | $\frac{1575}{8}$ |

Следовательно, положение последних теперь нетрудно рассчитать. Для возмущения $\varepsilon_1 \xi^3$ оно показано на фиг. 20 в зависимости от безразмерного параметра $\varepsilon_1/\hbar\omega$. Так как в данном случае эффект первого порядка отсутствует, то кривые, характеризующие положение уровней, представляют собой параболы с вершинами на прямой $\varepsilon_1 = 0$. Отрицательный знак возмущения обусловлен тем, что описывающая потенциал парабола уширяется в области более высоких значений ε_1 , где пренебречь этим эффектом уже нельзя. Роль эффекта уширения все более возрастает по мере продвижения в область высоких энергий, где даже второй порядок теории возмущений становится все менее надежным. В точке $\xi = -\hbar\omega/(3\varepsilon_1)$ у потенциальной энергии имеется максимум $V_{\text{макс}} = (\hbar\omega)^3/(54\varepsilon_1^2)$, поэтому для энергий $E > V_{\text{макс}}$ дискретные уровни перестают существовать: эффект, который нашим приближением не учитывается¹⁾.

Приведенные кривые в целом показывают, что чем выше энергия уровня, тем меньше значения параметра $\varepsilon_1/\hbar\omega$, характеризующего возмущение, для которых используемое приближение дает надежные результаты. Это же подтверждает и фиг. 21, где

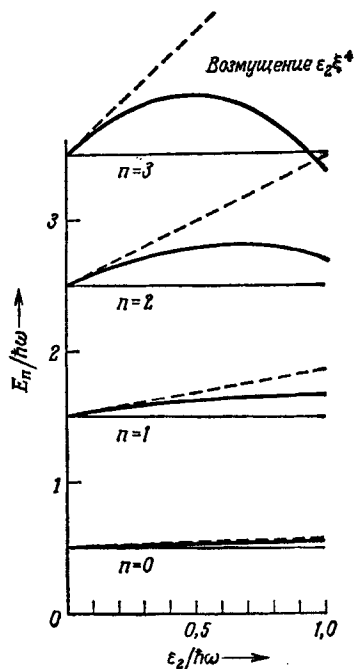
¹⁾ Строго говоря, при наличии возмущения $\varepsilon_1 \xi^3$ энергетический спектр является непрерывным, так что дискретных уровней в этом случае вообще не существует. См., например, Давыдов А. С., Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963, стр. 195 и далее.— *Прим. ред.*

пунктирные и сплошные линии относятся соответственно к поправкам первого и второго порядков. Разумеется, на результаты второго приближения совершенно нельзя полагаться там, где



Фиг. 20. Энергетические уровни ангармонического осциллятора с асимметричным возмущением.

Вклады от возмущения возникают только во втором приближении. Линия $V_{\max} / \hbar\omega$ грубо характеризует область применимости использованного приближения.



Фиг. 21. Энергетические уровни ангармонического осциллятора с симметричным возмущением.

Пунктирные линии соответствуют одному первому приближению, сплошные линии построены с учетом второго приближения.

соответствующие поправки, достигнув максимума, начинают убывать.

Задача 36. Приближенные волновые функции

Частица свободно движется по оси x между двумя абсолютно жесткими стенками, расположенными в точках $x = \pm a$. Аппроксимировать волновые функции основного и первого возбужденного состояний простейшими нормированными полиномами, имеющими те же нули, что и точные волновые функции, и сравнить точные значения энергии с приближенными.

Решение. Пусть u_0 и u_1 — точные волновые функции, а E_0 и E_1 — соответствующие им точные энергетические уровни двух

рассматриваемых состояний. Тогда (см. задачу 18)

$$u_0 = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{\pi^2}{4} \quad (36.1)$$

и

$$u_1 = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi x}{a}, \quad E_1 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \pi^2. \quad (36.2)$$

Простейшие полиномы с теми же нулями имеют вид

$$\tilde{u}_0 = \sqrt{\frac{15}{16a}} \left[1 - \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \quad (36.3)$$

и

$$\tilde{u}_1 = \sqrt{\frac{15}{16a}} \left[\frac{x}{a} - \left(\frac{x}{a} \right)^3 \right]. \quad (36.4)$$

Все четыре волновые функции (36.1)–(36.4) нормированы согласно условию

$$\int_{-a}^a u^2 dx = 1.$$

Максимум функции u_0 при $x=0$ равен 1 (в единицах $a^{-1/2}$), у функции \tilde{u}_0 максимум расположен в той же точке и равен $(15/16)^{1/2} = 0,970$, что лишь на 3% меньше. У функции u_1 экстремумы находятся в точках $x = \pm 1/2 a$ и равны ± 1 , в то время как экстремумы функции \tilde{u}_1 равны $\pm (35/36)^{1/2} = \pm 0,986$ и располагаются в точках $x = \pm (1/\sqrt{3})a = \pm 0,577a$, так что согласие по величине здесь еще лучше, но имеется сдвиг в положении.

Энергия во всех рассматриваемых случаях определяется выражением

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-a}^a \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx.$$

Для приближенных значений энергий уровней элементарное интегрирование дает

$$\tilde{E}_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{5}{2} \quad \text{и} \quad \tilde{E}_1 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \frac{21}{2}. \quad (36.5)$$

Выбрав в качестве единицы величину $\hbar^2/(2ma^2)$, можно сравнить численные значения энергий (36.1), (36.2) и (36.5):

$$\begin{aligned} E_0 &= 2,4674, & \tilde{E}_0 &= 2,5000, \\ E_1 &= 9,8696, & \tilde{E}_1 &= 10,5000. \end{aligned}$$

В обоих случаях приближенные значения энергий *превышают* точные. Значения E_0 и \tilde{E}_0 весьма близки друг к другу, согла-

сие между E_1 и \tilde{E}_1 несколько хуже, но и здесь ошибка не превышает 6%.

Задача 37. Потенциальная ступенька

Определить коэффициент отражения в поле потенциальной ступеньки:

$$V(x) = \frac{1}{2} V_0 \left(1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} \right) \quad (37.1)$$

Решение. Рассматриваемый потенциал монотонно возрастает от значения $V=0$ при $x=-\infty$ до значения $V=V_0$ при $x=+\infty$, при этом наиболее существенное возрастание потенциала происходит на отрезке $-2a < x < 2a$:

$$V(-2a) = 0,119V_0 \quad \text{и} \quad V(+2a) = 0,881V_0.$$

Волновая функция, описывающая приходящую слева волну, должна иметь асимптотический вид

$$u = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ Ce^{-Kx}, & \text{если } E < V_0 \text{ при } x \rightarrow +\infty, \\ Ce^{ik'x}, & \text{если } E > V_0 \text{ при } x \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (37.2)$$

Величина $|R|^2$ и есть искомый коэффициент отражения. Чтобы решить уравнение Шредингера

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V(x) \right] u = 0 \quad (37.3)$$

с потенциалом (37.1), введем вместо x новую переменную

$$y = (1 + e^{x/a})^{-1}. \quad (37.4)$$

Используя далее обозначения

$$\kappa^2 = k^2 a^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E, \quad \lambda^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} V_0 \quad (37.5)$$

и учитывая, что

$$\frac{d}{dx} = -\frac{1}{a} y(1-y) \frac{d}{dy},$$

$$1 + \operatorname{th} \frac{x}{2a} = 2(1-y),$$

получаем

$$y(1-y) \frac{d^2u}{dy^2} + (1-2y) \frac{du}{dy} + \left[\frac{\kappa^2}{y(1-y)} - \frac{\lambda^2}{y} \right] u = 0. \quad (37.6)$$

Это дифференциальное уравнение имеет три особые точки $y=0$, 1 , ∞ , и, следовательно, его решение выражается через гипергеометрическую функцию. С помощью подстановки

$$u(y) = y^\nu (1-y)^\mu f(y), \quad (37.7)$$

где

$$v^2 = \lambda^2 - \kappa^2, \quad \mu^2 = -\kappa^2, \quad (37.8)$$

уравнение (37.6) после несложных преобразований приводится к гипергеометрическому уравнению Гаусса в стандартной форме:

$$y(1-y)f'' + [(2v+1) - (2\mu+2v+2)y]f' - (\mu+v)(\mu+v+1)f = 0. \quad (37.9)$$

Сейчас мы покажем, что частное решение этого уравнения

$$f(y) = C {}_2F_1(\mu+v, \mu+v+1, 2v+1; y) \quad (37.10)$$

при надлежащем выборе постоянной C как раз удовлетворяет граничным условиям (37.2).

Начнем с предела $x \rightarrow +\infty$, когда $y \approx e^{-x/a} \rightarrow 0$, и, следовательно, решение (37.10) стремится к $f(0) = C$, так что

$$u(y) \rightarrow Cy^v \approx Ce^{-vx/a}. \quad (37.11)$$

Теперь необходимо различать две возможности.

а) $\lambda > \kappa$, v — действительное число и больше нуля. В этом случае выражение (37.11) экспоненциально убывает, как и должно быть при $E < V_0$. Таким образом, получаем

$$u \rightarrow Ce^{-Kx} \quad \text{и} \quad K^2 = \frac{v^2}{a^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E). \quad (37.12a)$$

б) $\lambda < \kappa$, $v = -ik'a$ — чисто мнимое число. Тогда

$$u \rightarrow Ce^{ik'x} \quad \text{и} \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0). \quad (37.12б)$$

С другой стороны, при $x \rightarrow -\infty$, когда $y \rightarrow 1$ и $1-y \approx e^{x/a} \rightarrow 0$, можно применить хорошо известные правила преобразования гипергеометрической функции от аргумента y в гипергеометрическую функцию от аргумента $1-y$:

$$\begin{aligned} & {}_2F_1(\mu+v, \mu+v+1, 2v+1; y) = \\ &= \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)} {}_2F_1(\mu+v, \mu+v+1, 2\mu+1; 1-y) + \\ &+ (1-y)^{-2\mu} \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+v)\Gamma(\mu+v+1)} {}_2F_1(v-\mu, v-\mu+1, -2\mu+1; 1-y). \end{aligned}$$

С учетом равенства $1-y = e^{x/a}$ это дает

$$u \rightarrow C \left\{ \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)} e^{\mu x/a} + \frac{\Gamma(2v+1)\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\mu+v)\Gamma(v+\mu+1)} e^{-\mu x/a} \right\}.$$

После подстановки

$$\mu = i\kappa, \quad \frac{\mu}{a} = ik \quad (37.13)$$

видим, что наше решение по форме будет совпадать с (37.2), если положить

$$C = \frac{\Gamma(v-\mu)\Gamma(v-\mu+1)}{\Gamma(2v+1)\Gamma(-2\mu)} \quad (37.14)$$

и

$$R = \frac{\Gamma(+2\mu) \Gamma(\nu-\mu) \Gamma(\nu-\mu+1)}{\Gamma(-2\mu) \Gamma(\nu+\mu) \Gamma(\nu+\mu+1)}. \quad (37.15)$$

Теперь снова необходимо различать две возможности:

$$E > V_0 \quad \text{и} \quad E < V_0.$$

а) $E < V_0$, $\mu = i\kappa$ — чисто мнимое число, ν — действительное число и больше нуля. Числитель и знаменатель дроби (37.15) представляют собой комплексно сопряженные величины, поэтому

$$|R|^2 = 1,$$

т. е. имеет место полное отражение.

б) $E > V_0$, $\mu = i\kappa$ и $\nu = -i\sigma$ — величины чисто мнимые. Теперь только множители $\Gamma(\pm 2\mu)$, являющиеся комплексно сопряженными величинами, не дают вклада в коэффициент отражения $|R|^2$. Так как далее

$$\Gamma(z) = \frac{1}{z} \Gamma(z+1),$$

то

$$|R|^2 = \left| \frac{(\nu+\mu) \Gamma^2(\nu-\mu+1)}{(\nu-\mu) \Gamma^2(\nu+\mu+1)} \right|^2 = \left(\frac{\kappa-\sigma}{\kappa+\sigma} \right)^2 \left[\left| \frac{\Gamma(1-i(\kappa+\sigma))}{\Gamma(1+i(\kappa-\sigma))} \right|^2 \right]^2.$$

Теперь можно воспользоваться элементарной формулой

$$|\Gamma(1+i\eta)|^2 = \frac{\pi\eta}{\text{sh } \pi\eta}.$$

Для коэффициента отражения окончательно получаем

$$|R|^2 = \left[\frac{\text{sh } \pi(\kappa-\sigma)}{\text{sh } \pi(\kappa+\sigma)} \right]^2, \quad (37.16)$$

или

$$|R|^2 = \left[\frac{\text{sh } \pi(k-k')a}{\text{sh } \pi(k+k')a} \right]^2, \quad (37.17)$$

где k и k' — волновые числа соответственно слева и справа от потенциальной ступеньки.

Замечание 1. В предельном случае очень малых a , т. е. в случае кусочно постоянного потенциала со скачком в точке $x=0$, последнее выражение принимает вид

$$|R|^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'} \right)^2. \quad (37.18)$$

Конечно, в этом случае нет необходимости пользоваться гипергеометрическими функциями, так как теперь граничные условия (37.2) выполняются не асимптотически, а на протяжении всей полупрямой:

$$\begin{aligned} u &= e^{ikx} + Re^{-ikx} & \text{при } x < 0, \\ u &= Ce^{ik'x} & \text{при } x > 0 \end{aligned} \quad (37.19)$$

(мы рассматриваем лишь физически интересный случай „б“). Требование непрерывности u и u' при $x=0$ дает

$$1+R=C, \quad ik(1-R)=ik'C,$$

следовательно,

$$C = \frac{2k}{k+k'}, \quad R = \frac{k-k'}{k+k'}. \quad (37.20)$$

Заметим, что эти выражения удовлетворяют соотношению

$$k(1-R^2) = k'C^2, \quad (37.21)$$

которое вытекает из непрерывности плотности тока вероятности в точке, где потенциал имеет разрыв.

Замечание 2. Новая переменная y , равенство (37.4), вводится для того, чтобы сделать коэффициенты дифференциального уравнения рациональными функциями и тем самым вернуться к классу хорошо изученных дифференциальных уравнений. Этой же цели можно добиться путем другой замены переменных:

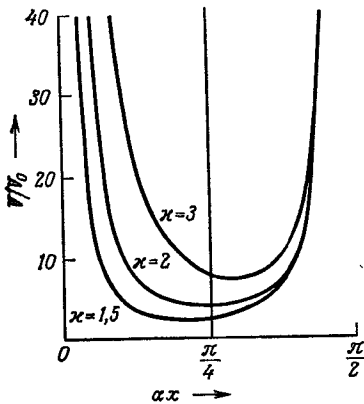
$$y = (1 + e^{-x/a})^{-1}. \quad (37.4a)$$

Замена переменных (37.4) была выбрана с таким расчетом, чтобы частное решение (37.10) удовлетворяло граничным условиям нашей весьма специальной задачи, что при замене переменных (37.4a) было бы невозможно. Тем не менее весьма поучительно провести все расчеты, пользуясь заменой переменных (37.4a).

Задача 38. Потенциальная яма Пешля — Теллера

Решить уравнение Шредингера с потенциалом

$$V(x) = \frac{1}{2} V_0 \left[\frac{\kappa(\kappa-1)}{\sin^2 \alpha x} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{\cos^2 \alpha x} \right], \quad V_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m}, \quad (38.1)$$



Фиг. 22. Три различные потенциальные ямы Пешля — Теллера, соответствующие $\lambda = 2$ и $\kappa \leq \lambda$. Потенциальная яма симметрична только при $\kappa = \lambda$.

где $\kappa > 1$ и $\lambda > 1$. Ограничиться рассмотрением интервала $0 \leq x \leq \pi/2\alpha$, на границах которого потенциал $V(x)$ обращается в бесконечность.

Решение. Потенциал (38.1) показан на фиг. 22 для случая $\lambda = 2$ и нескольких значений $\kappa > 1$. Если $\kappa = \lambda$, то яма оказывается симметричной по отношению к прямой $\alpha x = \pi/4$, если же $\kappa > \lambda$, то яма перекашивается таким образом, что ее минимум сдвигается в сторону больших значений x . При $1 < \kappa < \lambda$ минимум ямы сдвигается в противоположную сторону, а имеющаяся в точке $x = 0$ сингулярность становится менее четко выраженной и наконец совершенно исчезает, когда $\kappa = 1$. В этом случае потенциальные ямы, имеющиеся в интервалах $-\pi/2\alpha \leq x \leq 0$ и $0 \leq x \leq \pi/2\alpha$, объединяются в одну потенциальную яму большего размера. Рассмотрение последней можно свести, однако, к случаю

и наконец совершенно исчезает, когда $\kappa = 1$. В этом случае потенциальные ямы, имеющиеся в интервалах $-\pi/2\alpha \leq x \leq 0$ и $0 \leq x \leq \pi/2\alpha$, объединяются в одну потенциальную яму большего размера. Рассмотрение последней можно свести, однако, к случаю

$\kappa = \lambda$, если воспользоваться тождеством

$$\frac{1}{\cos^2 \alpha x} = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{\sin^2 \left(\frac{\alpha x}{2} - \frac{\pi}{4} \right)} + \frac{1}{\cos^2 \left(\frac{\alpha x}{2} - \frac{\pi}{4} \right)} \right]$$

и, кроме того, заменить α на $1/2\alpha$ и V_0 на $1/4V_0$.

Разумеется, потенциал (38.1) является периодическим, но практически это несущественно для решений уравнения Шредингера, так как между соседними ямами имеются непроницаемые барьеры, обусловленные сингулярностями потенциала $V(x)$. Таким образом, можно ограничиться рассмотрением одной-единственной потенциальной ямы, скажем в интервале $0 \leq x \leq \pi/2\alpha$, и решать в этом интервале уравнение Шредингера с граничными условиями

$$u = 0 \quad \text{при} \quad x = 0 \quad \text{и} \quad x = \frac{\pi}{2\alpha}. \quad (38.2)$$

Путем замены независимой переменной

$$y = \sin^2 \alpha x \quad (38.3)$$

уравнение Шредингера приводится к виду

$$y(1-y)u'' + \left(\frac{1}{2} - y\right)u' + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\alpha^2} - \frac{\kappa(\kappa-1)}{y} - \frac{\lambda(\lambda-1)}{1-y} \right] u = 0, \quad (38.4)$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}.$$

Это дифференциальное уравнение имеет три регулярные особые точки, $y = 0, 1, \infty$, поэтому подстановкой

$$u = y^\mu (1-y)^\nu f(y) \quad (38.5)$$

и надлежащим выбором значений μ и ν оно приводится к гипергеометрическому уравнению. В самом деле, положив

$$\mu = \frac{\kappa}{2}, \quad \nu = \frac{\lambda}{2}, \quad (38.6)$$

получаем

$$y(1-y)f'' + \left[\left(\kappa + \frac{1}{2} \right) - y(\kappa + \lambda + 1) \right] f' + \frac{1}{4} \left[\frac{k^2}{\alpha^2} - (\kappa + \lambda)^2 \right] f = 0. \quad (38.7)$$

Общее решение этого уравнения имеет вид

$$f = C_1 {}_2F_1(a, b, c; y) + C_2 y^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c, 2-c; y), \quad (38.8)$$

где

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2} \left(\kappa + \lambda + \frac{k}{\alpha} \right), \\ b &= \frac{1}{2} \left(\kappa + \lambda - \frac{k}{\alpha} \right), \\ c &= \kappa + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (38.9)$$

В выражении (38.8) мы еще должны определить постоянные интегрирования C_1 и C_2 так, чтобы выполнялись граничные условия (38.2), которые, если пользоваться переменной y , гласят

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 0. \quad (38.2a)$$

В точке $y=0$ оба гипергеометрических ряда обращаются в единицу, поэтому

$$u \approx y^\kappa (C_1 + C_2 y^{1/2 - \kappa}) = C_1 y^{\kappa/2} + C_2 y^{(1-\kappa)/2}.$$

Так как $\kappa > 1$, то у второго слагаемого имеется сингулярность, отсюда следует, что $C_2 = 0$. Чтобы рассмотреть случай $y=1$, воспользуемся преобразованием

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a, b, c; y) &= \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-y) + \\ &+ \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-y)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-y). \end{aligned}$$

Так как $c-a-b = 1/2 - \lambda$, то второе слагаемое в этом выражении дает вклад в решение u в окрестности точки $y=1$:

$$u = \dots + C_1 (1-y)^{\nu+c-a-b} \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}.$$

При показателе

$$\nu + c - a - b = \frac{1}{2} (1 - \lambda) < 0$$

этот вклад сингулярен, и граничному условию можно удовлетворить только в том случае, когда во втором слагаемом обращается в нуль множитель, содержащий Γ -функции, другими словами, лишь тогда, когда либо a , либо b — целое отрицательное число. Если

$$a = -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (38.10)$$

то в силу равенства (38.9)

$$b = \kappa + \lambda + n$$

и, следовательно, b — положительное число. Если же $b = -n$, то $a = \kappa + \lambda + n$. Так как при замене параметра a параметром b волновая функция не меняется, то оба условия приводят к тому же самому решению. Заменяя в равенстве (38.10) параметр a его выражением (38.9), получаем следующую формулу для собст-

венных значений:

$$k^2 = \alpha^2 (\kappa + \lambda + 2n)^2 \quad \text{или} \quad E_n = \frac{1}{2} V_0 (\kappa + \lambda + 2n)^2. \quad (38.11)$$

Соответствующие им собственные функции имеют вид

$$u_n(x) = C_1 \sin^\kappa \alpha x \cos^\lambda \alpha x \times {}_2F_1\left(-n, \kappa + \lambda + n, \kappa + \frac{1}{2}; \sin^2 \alpha x\right), \quad (38.12)$$

где постоянную C_1 следует выбрать сообразно условию нормировки. На фиг. 23 показана зависимость энергетических уровней от параметра асимметрии κ при $\lambda = 2$. Сопоставляя приведенные результаты с кривыми потенциальной энергии, изображенными на фиг. 22, мы видим, что, чем уже потенциальная яма, тем выше, как и следовало ожидать, располагаются энергетические уровни. Если $2n \gg \kappa + \lambda$, то собственные значения (38.11) приближенно описываются формулой $k^2 = 4\alpha^2 n^2$ ($n = 1, 2, \dots$), соответствующей случаю прямоугольной потенциальной ямы. Этот результат также вполне разумен, поскольку по мере роста энергии искривление дна потенциальной ямы должно играть все меньшую и меньшую роль.

Замечание. Вблизи минимума кривую потенциальной энергии приближенно можно заменить параболой, т. е. потенциалом осциллятора. Ограничиваясь случаем $\kappa = \lambda$, когда потенциал имеет минимум в точке $\alpha x = \pi/4$, и вводя переменную

$$z = x - \frac{\pi}{4\alpha},$$

имеем

$$V = 4V_0\lambda(\lambda - 1) \left[\frac{1}{2} + \alpha^2 z^2 + O(z^4) \right].$$

Положим далее множитель при z^2 равным $\frac{1}{2} m \omega^2$, тогда

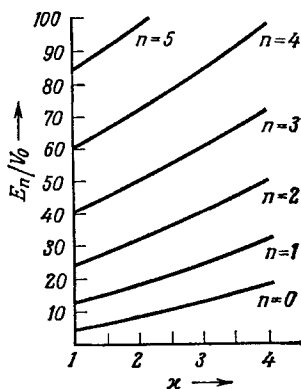
$$\omega = 2 \sqrt{2\lambda(\lambda - 1)} \frac{\hbar}{m} \alpha^2.$$

Если теперь пренебречь отклонением нашего потенциала от потенциала гармонического осциллятора, то допустимые значения энергии будут равны

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2V_0\lambda(\lambda - 1)$$

или

$$\frac{E_n}{V_0} = 2 \sqrt{2\lambda(\lambda - 1)} \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2\lambda(\lambda - 1).$$



Фиг. 23. Зависимость энергетических уровней от параметра асимметрии κ для потенциалов Пешля—Теллера с $\lambda = 2$.

Это приближение, разумеется, оправдано только в том случае, если в классических точках поворота z_t величина $1/\alpha$ гораздо больше $|z|$, другими словами, если

$$\alpha^2 z_t^2 = \frac{n + \frac{1}{2}}{\sqrt{2\lambda(\lambda-1)}} \ll 1.$$

Этот результат является точным в пределе $\alpha \rightarrow 0$, $\lambda \rightarrow \infty$ при постоянном $\lambda\alpha^2$.

Литература

Pöschl G., Teller E., Zs. Phys., **83**, 143 (1933).

Rosen N., Morse P. M., Phys. Rev., **42**, 210 (1932).

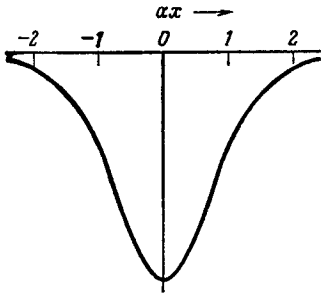
Lotmar W., Zs. Phys., **93**, 528 (1935).

Задача 39. Модифицированная потенциальная яма Пешля — Теллера

Решить одномерное уравнение Шредингера с потенциалом (фиг. 24)

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 \frac{\lambda(\lambda-1)}{\operatorname{ch}^2 \alpha x}, \quad (39.1)$$

где $\lambda > 1$. Для положительных энергий определить коэффициент отражения и коэффициент прохождения, для отрицательных — энергетические уровни связанных состояний.



Решение. Перейдем в уравнении Шредингера

$$u'' + \left\{ k^2 + \frac{\alpha^2 \lambda(\lambda-1)}{\operatorname{ch}^2 \alpha x} \right\} u = 0, \quad (39.2)$$

где $k^2 = 2mE/\hbar^2$, к новой переменной

$$y = \operatorname{ch}^2 \alpha x. \quad (39.3)$$

Это даст

$$y(1-y)u'' + \left(\frac{1}{2} - y \right) u' - \left\{ \frac{k^2}{4\alpha^2} + \frac{\lambda(\lambda-1)}{4y} \right\} u = 0.$$

Фиг. 24. Потенциальная яма в случае модифицированного потенциала Пешля — Теллера.

После подстановки

$$u = y^{\lambda/2} v(y) \quad (39.4)$$

последнее уравнение приводится к гипергеометрическому уравнению

$$y(1-y)v'' + \left[\left(\lambda + \frac{1}{2} \right) - (\lambda + 1)y \right] v' - \frac{1}{4} \left(\lambda^2 + \frac{k^2}{\alpha^2} \right) v = 0. \quad (39.5)$$

Вводя обозначения

$$a = \frac{1}{2} \left(\lambda + i \frac{k}{\alpha} \right), \quad b = \frac{1}{2} \left(\lambda - i \frac{k}{\alpha} \right), \quad (39.6)$$

можно записать общее решение уравнения (39.5) в виде¹⁾

$$v(y) = A {}_2F_1\left(a, b, \frac{1}{2}; 1-y\right) + B(1-y)^{1/2} \times \\ \times {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2}, b + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; 1-y\right), \quad (39.7)$$

так что при $x=0$ или $y=1$ волновая функция будет стремиться к выражению

$$u(0) = A + B(1-y)^{1/2}. \quad (39.8)$$

В качестве фундаментальной системы решений выберем два действительных стандартных решения u_e и u_o соответственно, четное и нечетное по отношению к изменению знака переменной x :

$$u_e(-x) = u_e(x), \quad u_o(-x) = -u_o(x). \quad (39.9)$$

При $B=0$ и $A=1$ получаем стандартное четное решение

$$u_e(x) = \text{ch}^\lambda \alpha x {}_2F_1\left(a, b, \frac{1}{2}; -\text{sh}^2 \alpha x\right), \quad (39.10a)$$

а при $A=0$ и $B=i$ —стандартное нечетное решение

$$u_o(x) = \text{ch}^\lambda \alpha x \text{sh} \alpha x {}_2F_1\left(a + \frac{1}{2}, b + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -\text{sh}^2 \alpha x\right). \quad (39.10б)$$

Свойства этих решений мы подробно обсудим ниже.

Для ответа на вопросы задачи нам прежде всего необходимо выяснить асимптотическое поведение решений (39.10a) и (39.10б) при больших отрицательных значениях аргумента:

$$-\text{sh}^2 \alpha x \rightarrow -2^{-2} e^{2\alpha |x|}.$$

Хорошо известные формулы дают

$$u_e(x) \rightarrow 2^{-\lambda} e^{\lambda \alpha |x|} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma(b) \Gamma\left(\frac{1}{2}-a\right)} 2^{2a} e^{-2a\alpha |x|} + \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(a-b)}{\Gamma(a) \Gamma\left(\frac{1}{2}-b\right)} 2^{2b} e^{-2b\alpha |x|} \right] \quad (39.11a)$$

¹⁾ Нас интересует решение в области $0 \leq |x| < \infty$ или $1 \leq y < \infty$. Гипергеометрическое уравнение

$$y(1-y)v'' + [c - (a+b+1)y]v' - abv = 0$$

после перехода к новой независимой переменной $z=1-y$ принимает вид

$$z(1-z)v'' + [c' - (a+b+1)z]v' - abv = 0,$$

где $c' = a+b+1-c$. Для новой независимой переменной z решение (39.7) принимает стандартную форму. Нужной нам областью изменения z является полупрямая $-\infty < z \leq 0$.

и

$$u_o(x) \rightarrow \pm 2^{-(\lambda+1)} e^{(\lambda+1)\alpha|x|} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \times \\ \times \left[\frac{\Gamma(b-a)}{\Gamma\left(b+\frac{1}{2}\right)\Gamma(1-a)} 2^{2a+1} e^{-(2a+1)\alpha|x|} + \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(a-b)}{\Gamma\left(a+\frac{1}{2}\right)\Gamma(1-b)} 2^{2b+1} e^{-(2b+1)\alpha|x|} \right], \quad (39.116)$$

где знаки $+$ и $-$ относятся соответственно к случаям $x > 0$ и $x < 0$. Если энергия *положительна*, то в силу равенства (39.6) a и b — комплексно сопряженные величины, поэтому

$$u_e(x) \rightarrow \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(-ik/\alpha) e^{i\frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)} e^{-ik|x|} + \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(ik/\alpha) e^{-i\frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)} e^{ik|x|} \right] \quad (39.12a)$$

и

$$u_o(x) \rightarrow \pm \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \left[\frac{\Gamma(-ik/\alpha) e^{i\frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}-i\frac{k}{2\alpha}\right)} e^{-ik|x|} + \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(ik/\alpha) e^{-i\frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)} e^{ik|x|} \right]. \quad (39.126)$$

Вводя обозначения

$$\varphi_e = \arg \frac{\Gamma(ik/\alpha) e^{-i\frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{1-\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)} \quad (39.13a)$$

и

$$\varphi_o = \arg \frac{\Gamma(ik/\alpha) e^{-i\frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda-1}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)\Gamma\left(1-\frac{\lambda}{2}+i\frac{k}{2\alpha}\right)}, \quad (39.136)$$

можно записать последние выражения в более компактном виде

$$u_e \rightarrow C_e \cos(k|x| + \varphi_e); \\ u_o \rightarrow \pm C_o \cos(k|x| + \varphi_o) \quad \text{при } x > 0 \quad \text{и } x < 0. \quad (39.14)$$

Фигурирующие здесь амплитуды можно было бы вычислить с помощью соотношений (39.12а) и (39.12б), однако их конкретные значения для дальнейшего не существенны.

Образум теперь линейную комбинацию рассмотренных выше фундаментальных решений:

$$u = Au_e + Bu_o,$$

так что для случаев $x > 0$ и $x < 0$ соответственно будем иметь

$$u = \frac{A}{2} C_e (e^{i\varphi_e} e^{ikx} + e^{-i\varphi_e} e^{-ikx}) + \frac{B}{2} C_o (e^{i\varphi_o} e^{ikx} + e^{-i\varphi_o} e^{-ikx})$$

и

$$u = \frac{A}{2} C_e (e^{i\varphi_e} e^{-ikx} + e^{-i\varphi_e} e^{ikx}) - \frac{B}{2} C_o (e^{i\varphi_o} e^{-ikx} + e^{-i\varphi_o} e^{ikx}).$$

Нас интересует решение с асимптотикой

$$u = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & \text{при } x < 0, \\ Te^{ikx} & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (39.15)$$

Следовательно, в нашем случае должно быть

$$\frac{A}{2} C_e e^{i\varphi_e} + \frac{B}{2} C_o e^{i\varphi_o} = T,$$

$$\frac{A}{2} C_e e^{-i\varphi_e} + \frac{B}{2} C_o e^{-i\varphi_o} = 0,$$

$$\frac{A}{2} C_e e^{i\varphi_e} - \frac{B}{2} C_o e^{i\varphi_o} = R,$$

$$\frac{A}{2} C_e e^{-i\varphi_e} - \frac{B}{2} C_o e^{-i\varphi_o} = 1.$$

Из второго и четвертого уравнений можно определить произведения AC_e и BC_o , а затем из первого и третьего — амплитуды T и R :

$$T = \frac{1}{2} (e^{2i\varphi_e} - e^{2i\varphi_o}), \quad R = \frac{1}{2} (e^{2i\varphi_e} + e^{2i\varphi_o}). \quad (39.16)$$

Зная амплитуды для коэффициентов прохождения и отражения, получаем соответственно выражения

$$|T|^2 = \sin^2(\varphi_e - \varphi_o) \quad (39.17)$$

и

$$|R|^2 = \cos^2(\varphi_e - \varphi_o). \quad (39.18)$$

Эти выражения удовлетворяют соотношению

$$|T|^2 + |R|^2 = 1$$

и зависят только от разности фазовых углов собственных функций, но не зависят от их нормировки.

Чтобы вычислить коэффициенты (39.17) и (39.18), вернемся к соотношениям (39.13), из которых следует

$$\begin{aligned} \varphi_e - \varphi_o &= \arg \Gamma \left(iq + \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{2} \right) + \arg \Gamma \left(iq + 1 - \frac{\lambda}{2} \right) - \\ &\quad - \arg \Gamma \left(iq + \frac{\lambda}{2} \right) - \arg \Gamma \left(iq + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} \right), \end{aligned} \quad (39.19)$$

где

$$q = \frac{k}{2\alpha}.$$

Из общей формулы

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

вытекает

$$\arg \Gamma(z) - \arg \Gamma(1-z^*) = -\operatorname{arcsin} \pi z. \quad (39.20)$$

Полагая далее

$$iq + \frac{\lambda}{2} + \frac{1}{2} = z_1$$

и

$$iq + \frac{\lambda}{2} = z_2,$$

имеем

$$iq + \frac{1}{2} - \frac{\lambda}{2} = 1 - z_1^* \quad \text{и} \quad iq + 1 - \frac{\lambda}{2} = 1 - z_2^*.$$

Теперь с помощью формулы (39.20) можно объединить соответствующие пары аргументов, фигурирующие в выражении (39.19), что в итоге даст

$$\begin{aligned} \varphi_e - \varphi_o &= -\operatorname{arcsin} \pi \left(\frac{\lambda+1}{2} + iq \right) + \operatorname{arcsin} \pi \left(\frac{\lambda}{2} + iq \right) = \\ &= \operatorname{arctg} \left(\operatorname{tg} \frac{\pi\lambda}{2} \operatorname{th} \pi q \right) + \operatorname{arctg} \left(\operatorname{ctg} \frac{\pi\lambda}{2} \operatorname{th} \pi q \right). \end{aligned}$$

Последнее выражение после элементарных преобразований принимает вид

$$\varphi_e - \varphi_o = \operatorname{arctg} \left(\frac{\operatorname{sh} \pi k / \alpha}{\sin \pi \lambda} \right). \quad (39.21)$$

Если параметр λ , характеризующий глубину ямы, является целым числом, то знаменатель дроби обращается в нуль, так что $\varphi_e - \varphi_o = \pi/2$, и в силу соотношений (39.17) и (39.18) имеем $|T|^2 = 1$, $|R|^2 = 0$. В этом случае волна, соответствующая падающей частице, независимо от ее энергии проходит через область, занятую ямой, совершенно не отражаясь (заметим, что при $\lambda = 1$ этот результат самоочевиден). В предельном случае $E = 0$, (т. е. $\pi k / \alpha = 0$) в выражении (39.21) обращается в нуль числитель, поэтому для нецелых значений λ разность $\varphi_e - \varphi_o = 0$, и мы имеем дело с полным отражением: $|T|^2 = 0$, $|R|^2 = 1$.

Коэффициенты $|T|^2$ и $|R|^2$ при произвольных значениях λ можно записать в виде

$$|R|^2 = \frac{1}{1+p^2}, \quad |T|^2 = \frac{p^2}{1+p^2}, \quad (39.22)$$

где

$$p = \frac{\text{sh } \pi k/\alpha}{\sin \pi \lambda}.$$

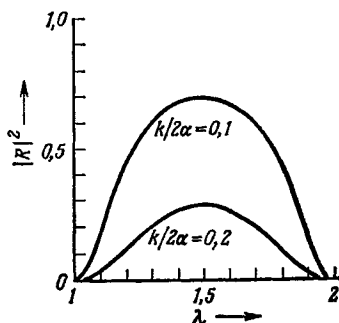
На фиг. 25 показана зависимость коэффициента отражения от глубины потенциальной ямы для двух энергий, соответствующих значениям $k/2\alpha = 0,1$ и $k/2\alpha = 0,2$. Эта же картина повторяется и в любом другом интервале $n < \lambda < n+1$, где n —целое число.

Связанные состояния. При отрицательных энергиях существуют дискретные собственные значения. В этом случае можно положить $k = i\kappa$, так что энергия будет равна

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}, \quad (39.23)$$

а параметры (39.6)

$$a = \frac{1}{2} \left(\lambda - \frac{\kappa}{\alpha} \right), \quad b = \frac{1}{2} \left(\lambda + \frac{\kappa}{\alpha} \right) \quad (39.24)$$



Фиг. 25. Зависимость коэффициента отражения от глубины потенциальной ямы для двух значений энергии.

будут действительными величинами. Снова можно воспользоваться асимптотическими формулами (39.11а) и (39.11б), однако теперь в этих формулах первое и второе слагаемые ведут себя соответственно как $e^{\kappa|x|}$ и $e^{-\kappa|x|}$. При $x > 0$ существование нормируемых решений возможно лишь в том случае, когда фигурирующий в первом слагаемом множитель обращается в нуль. Теперь все аргументы Γ -функций действительны, а их полюсы расположены в точках, соответствующих целым отрицательным числам $-n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), поэтому собственные значения находятся из соотношений: в случае четных состояний

$$\frac{1-\lambda}{2} + \frac{\kappa}{2\alpha} = -n,$$

или

$$\frac{\kappa}{\alpha} = \lambda - 1 - 2n,$$

а в случае нечетных состояний

$$1 - \frac{\lambda}{2} + \frac{\kappa}{2\alpha} = -n,$$

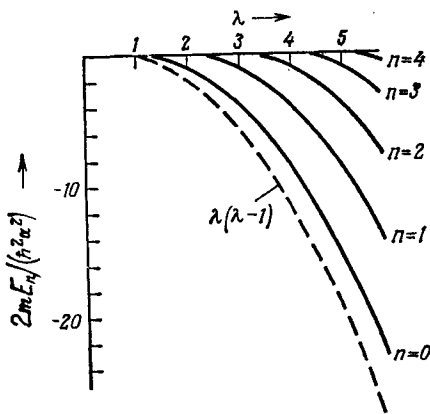
или

$$\frac{x}{a} = \lambda - 2 - 2n.$$

Отсюда после очевидных изменений в обозначениях для уравнений энергии получаем

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} (\lambda - 1 - n)^2, \quad n \leq \lambda - 1. \quad (39.25)$$

При четных n эта формула дает уровни четных состояний, а при нечетных n — уровни нечетных состояний. На фиг. 26 показана зависимость энергии связанных состояний от размера потенциальной ямы. Следует отметить, что при целом λ всегда имеется один связанный уровень ($n = \lambda - 1$) с нулевой энергией.



Фиг. 26. Зависимость энергии связанных состояний от размера модифицированных потенциальных ям Пешля — Теллера.

Пунктирная линия характеризует глубину потенциальной ямы.

Задача 40. Свободное падение вблизи земной поверхности

Частица движется в однородном гравитационном поле над поверхностью земли, которая предполагается абсолютно упругой (например, стальной шарик, танцующий на стеклянной горизонтальной пластине). Проанализировать эту классическую задачу с точки зрения квантовой теории.

Решение. В квантовой теории скачком стального шарика соответствует стационарное состояние. Для отыскания этого состояния необходимо решить уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + (mgx - E) u = 0 \quad (40.1)$$

в области $x > 0$. Выше через x обозначена высота над поверхностью земли, а гравитационный потенциал взят, как обычно, в виде $V(x) = mgx$. Предположение об абсолютно упругом характере отражения при $x = 0$ приводит к граничному условию

$$u(0) = 0. \quad (40.2a)$$

Кроме того, сюда следует добавить естественное условие

$$u(\infty) \rightarrow 0. \quad (40.2b)$$

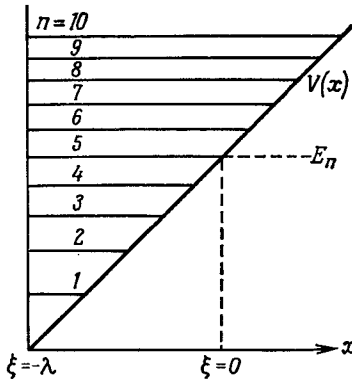
Если ввести обозначения

$$\frac{2m^2g}{\hbar^2} = \frac{1}{l^2}, \quad \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\lambda}{l^2} \quad (40.3)$$

и безразмерную переменную

$$\xi = \frac{x}{l} - \lambda, \quad (40.4)$$

где l — характерная длина, то уравнение (40.1) и граничные условия (40.2а) и (40.2б) примут соответственно вид

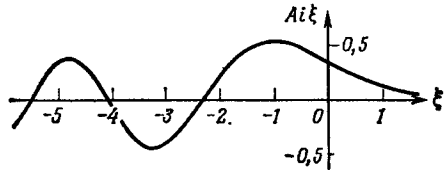


Фиг. 27. Первые десять энергетических уровней в гравитационном поле над поверхностью земли.

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \xi u = 0 \quad (40.5)$$

и

$$u(-\lambda) = 0; \quad u(\infty) \rightarrow 0. \quad (40.6)$$



Фиг. 28. Функция Эйри.

Классически разрешенная область движения заключена между классическими точками поворота $\xi = -\lambda$ и $\xi = 0$ (фиг. 27), т. е. ей соответствуют исключительно отрицательные значения переменной ξ .

Решения дифференциального уравнения (40.5) выражаются через функции Бесселя порядка $1/3$. Решение же, удовлетворяющее граничному условию $u(\infty) = 0$, представляет собой функцию Эйри (см. фиг. 28)¹⁾

$$u(\xi) = C \cdot \text{Ai } \xi. \quad (40.7)$$

Для положительных значений ξ , т. е. правее точки поворота $\xi = 0$ ($x = \lambda l$) на фиг. 27, эту функцию можно выразить через модифицированную функцию Ханкеля:

$$\text{Ai } \xi = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\xi}{3}} K_{1/3} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right), \quad \xi > 0. \quad (40.8)$$

¹⁾ В настоящее время имеются хорошие таблицы функции Эйри и ее нулей. См., например, *Abramowitz M., Stegun I. E., Handbook of Mathematical Functions*, New York, Dover Publ., 1965. Приводимая ниже таблица нулей взята из указанного источника. (См. также *Яковлев Г. Д., Таблицы функций Эйри*, изд-во „Наука“, М., 1969. — *Прим. ред.*)

Ее асимптотика получается из общей формулы

$$K_\nu(z) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}, \quad z \rightarrow \infty,$$

в силу которой

$$u(\xi) \rightarrow C \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \xi^{-1/2} e^{-\frac{2}{3} \xi^{3/2}} \quad \text{при } \xi \rightarrow +\infty. \quad (40.9)$$

В классической области, т. е. для отрицательных значений ξ , функция Эйри выражается линейной комбинацией функций Бесселя:

$$\text{Ai}(-\xi) = \frac{\sqrt{\xi}}{3} \left[J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) \right],$$

или

$$u(\xi) = \frac{C}{3} \sqrt{|\xi|} \left[J_{1/3} \left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) \right], \quad \xi < 0. \quad (40.10)$$

В силу второго граничного условия (40.6) решение должно обращаться в нуль при $\xi = -\lambda$. Так как величина λ при подходящем выборе единиц представляет собой энергию, то отсюда для определения допустимых значений энергии получаем

$$\text{Ai}(-\lambda) = 0 \quad (40.11a)$$

или

$$J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \lambda^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} \lambda^{3/2} \right) = 0. \quad (40.11b)$$

Первые десять нулей функции Эйри приведены в нижеследующей таблице.

| $\text{Ai}(-\lambda_n) = 0$ | |
|-----------------------------|-------------|
| n | λ_n |
| 1 | 2,338 |
| 2 | 4,088 |
| 3 | 5,521 |
| 4 | 6,787 |
| 5 | 7,944 |
| 6 | 9,023 |
| 7 | 10,040 |
| 8 | 11,009 |
| 9 | 11,936 |
| 10 | 12,829 |

Соответствующие этим нулям уровни энергии показаны на фиг. 27. Для определения более высоких уровней, когда $\lambda \gg 1$, можно

воспользоваться асимптотическими формулами

$$J_{1/2}(z) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{5\pi}{12}\right), \quad J_{-1/2}(z) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{12}\right),$$

из которых следует, что при больших отрицательных значениях ξ

$$u(\xi) \rightarrow \frac{C}{\sqrt{\pi}} |\xi|^{-1/2} \cos\left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (40.12)$$

Отсюда в дополнение к приведенной таблице при $n \gg 1$ получается соотношение

$$\frac{2}{3} \lambda_n^{3/2} = \left(2n - \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{2}. \quad (40.13)$$

Последнее после очевидных преобразований принимает вид

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \left\{ \frac{3\pi}{4} \left(2n - \frac{1}{2}\right) \right\}^{2/3} \text{ при } n \gg 1. \quad (40.14)$$

Замечание 1. Асимптотические формулы (40.9) и (40.12) полностью согласуются с формулами, которые получаются с помощью метода ВКБ (см. задачу 115, где рассмотрен вопрос об аналитическом продолжении волновой функции за классическую точку поворота без использования функции Эйри).

Замечание 2. Характерную длину l , фигурирующую в данной задаче, можно вычислить для любого значения массы m . Для электрона мы находим $l = 0,088$ см, для частиц с большей массой получаются меньшие значения ($l \sim m^{-2/3}$). Фундаментальная энергетическая постоянная данной задачи, согласно равенству (40.14), имеет вид

$$e = \frac{\hbar^2}{2ml^2},$$

что в случае электрона составляет $1,03 \times 10^{-26}$ эрг¹⁾. Порядки приведенных величин дают наглядное представление о крайней малости квантовых эффектов в случае макроскопических тел. Для таких тел длина волны, отвечающая функции (40.12), будет чрезвычайно мала и, следовательно, лишь усредненное по многим периодам выражение u^2 будет иметь непосредственный физический смысл:

$$\overline{u^2} = \frac{C^2}{2\pi} |\xi|^{-1/2} = \frac{C^2}{2\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\lambda - \frac{x}{l}}}.$$

Обозначая через $h = \lambda l$ высоту в классической области, мы, таким образом, имеем

$$\overline{u^2} \sim \frac{1}{\sqrt{h-x}},$$

что в точности соответствует предсказаниям классической теории. В самом деле, $\overline{u^2} dx$ есть вероятность обнаружить частицу (ганцующую в стационарном состоянии!) в интервале dx . Так как эта же вероятность пропорциональна

¹⁾ Приведенные значения прежде всего следует сравнить со значениями соответствующих величин в задачах атомной физики. Так, радиус первой бортовской орбиты равен $5,29 \times 10^{-9}$ см, а энергия ионизации атома водорода составляет $2,18 \times 10^{-11}$ эрг. Это сравнение показывает, что в задачах атомной физики влияние силы тяжести можно не учитывать. — *Прим. ред.*

времени dt , в течение которого частица находится в указанном интервале, то

$$\overline{u^2} dx \sim dt,$$

и для скорости частицы получаем $v = dx/dt \sim \sqrt{h-x}$, что, очевидно, согласуется с классическим выражением

$$v = \sqrt{2g(h-x)}.$$

Любопытно отметить значительные математические трудности, возникающие при решении рассматриваемой задачи, которая в классической механике является одной из самых простейших.

Замечание 3. В данной задаче нулевая энергия, $E_1 = \varepsilon \lambda_1$, по порядку величины равна ε . Этот результат легко получается с помощью соотношения неопределенности, $\Delta p \cdot \Delta x = \hbar$. Действительно, $\Delta p \approx \sqrt{2mE}$, а размеры классической области равны $\Delta x = E/mg$. Таким образом, имеем

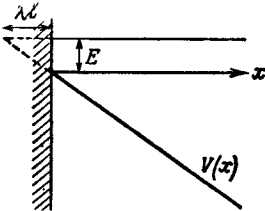
$$\Delta p \cdot \Delta x = \sqrt{2mE} \cdot \frac{E}{mg} = \hbar,$$

что для энергии дает величину ожидаемого порядка:

$$E = \sqrt[3]{\frac{1}{2} \hbar^3 mg^2} = \varepsilon.$$

Задача 41. Ускоряющее электрическое поле

Пусть металлическая пластина испускает в положительном направлении оси x поток электронов с начальной энергией E , которые потом ускоряются электрическим полем \mathcal{E} , приложенным в том же направлении. Сопоставить классическую формулу для скорости электронов на расстоянии x от поверхности излучающей пластины,



$$\frac{1}{2} mv^2 = E + e\mathcal{E}x, \quad (41.1)$$

Фиг. 29. Ускорение электронов однородным электрическим полем.

с результатами квантовомеханического анализа данной задачи.

Решение. Так как $V(x) = -e\mathcal{E}x$, то необходимо решить уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dx^2} - e\mathcal{E}xu = Eu \quad (41.2)$$

в области $x > 0$ (фиг. 29), причем нужные нам решения этого уравнения должны представлять собой волны, распространяющиеся в положительном направлении оси x . Как и в предыдущей задаче, введем характерную длину l и безразмерный энергетический параметр λ , определенные соотношениями

$$\frac{2m e \mathcal{E}}{\hbar^2} = \frac{1}{l^3}, \quad \frac{2m E}{\hbar^2} = \frac{\lambda}{l^2}, \quad (41.3)$$

а также безразмерную переменную

$$\xi = \frac{x}{l} + \lambda. \quad (41.4)$$

В результате получаем дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + \xi u = 0, \quad (41.5)$$

которое требуется решить в области $\xi > \lambda$.

Решение, соответствующее расходящимся волнам, имеет вид

$$u(\xi) = C \sqrt{\frac{\pi}{3} \xi} H_{1/3}^{(1)} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right). \quad (41.6)$$

Как следует из формулы

$$H_{1/3}^{(1)} \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left[i \left(z - \frac{5\pi}{12} \right) \right],$$

оно имеет асимптотику ¹⁾

$$u(\xi) \rightarrow C e^{-\frac{5\pi i}{12}} \xi^{-1/2} e^{\frac{2i}{3} \xi^{3/2}}. \quad (41.7)$$

Чтобы сопоставить выражение (41.1) с нашими результатами, сравним теперь плотность потока частиц

$$s = \frac{\hbar}{2im} \left(u^* \frac{du}{dx} - u \frac{du^*}{dx} \right) \quad (41.8)$$

с плотностью частиц

$$\rho = u^* u; \quad (41.9)$$

отношение этих плотностей даст нам скорость частицы v . Из формулы (41.7) получаем

$$\frac{du}{dx} = \frac{1}{l} \left(-\frac{1}{4\xi} + i \sqrt{\xi} \right) u,$$

так что соотношение (41.8) теперь дает

$$s = \frac{\hbar}{2iml} \left[\left(-\frac{1}{4\xi} + i \sqrt{\xi} \right) - \left(-\frac{1}{4\xi} - i \sqrt{\xi} \right) \right] u^* u,$$

или

$$v = \frac{s}{\rho} = \frac{\hbar}{ml} \sqrt{\xi} = \frac{\hbar}{m} \frac{\sqrt{x + \lambda l}}{l^{3/2}},$$

¹⁾ Заметьте, что асимптотика (41.7) совпадает с асимптотикой, получаемой методом ВКБ. Здесь, как и в предыдущей задаче, мы не пользуемся функцией Эйри, поскольку в данном случае никаких трудностей с аналитическим продолжением не возникает. Более того, нужное нам решение представляет собой линейную комбинацию функций Эйри первого и второго рода:

$$u = C \sqrt{\pi \xi}^{-\frac{i\pi}{6}} [\text{Ai}(-\xi) - i \text{Bi}(-\xi)].$$

что с помощью равенств (41.3) можно записать в виде

$$v = \sqrt{\frac{2e\mathcal{E}}{m} \left(x + \frac{E}{e\mathcal{E}} \right)} = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{e\mathcal{E}x + E}$$

в полном согласии с формулой (41.1).

В наших рассуждениях мы пользовались асимптотикой волновой функции, т. е. считали, что $\xi \gg 1$ или $x \gg l$. Характерную длину l можно вычислить по формуле (41.3). В случае электрона и для вполне разумного значения напряженности поля $\mathcal{E} = 300$ В/см (или 1 эл. стат. ед.) получаем $l = 3,69 \times 10^{-6}$ см. Таким образом, условие $x \gg l$, как правило, выполняется очень хорошо.

Б. Задачи с двумя или тремя степенями свободы без сферической симметрии

Задача 42. Круговой осциллятор

Исследовать движение точечной частицы в двумерном потенциальном поле

$$V = \frac{m}{2} \omega^2 (x^2 + y^2). \quad (42.1)$$

Решить задачу в прямоугольных декартовых и полярных координатах с

$$r^2 = x^2 + y^2. \quad (42.2)$$

Полученные результаты сравнить.

Решение

а. В прямоугольных декартовых координатах уравнение Шредингера допускает разделение переменных:

$$u(x, y) = f(x) \cdot g(y),$$

причем каждый из сомножителей удовлетворяет уравнению для одномерного осциллятора (см. задачу 30):

$$f'' + (k_1^2 - \lambda^2 x^2) f = 0, \quad g'' + (k_2^2 - \lambda^2 y^2) g = 0,$$

где

$$k_1^2 + k_2^2 = k^2, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}.$$

Таким образом, для собственных значений имеем

$$k_1^2 = 2\lambda \left(n_1 + \frac{1}{2} \right), \quad k_2^2 = 2\lambda \left(n_2 + \frac{1}{2} \right),$$

или

$$E = \hbar\omega (n_1 + n_2 + 1), \quad n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots, \quad (42.3)$$

а соответствующие волновые функции имеют вид

$$u_{n_1 n_2}(x, y) = f_{n_1}(x) f_{n_2}(y),$$

где посредством f_{n_i} обозначены одномерные осцилляторные функции, определяемые выражением (30.10) с нормировочными постоянными (30.11). Энергетические уровни в данном случае вырождены, потому что сумму

$$n_1 + n_2 = n, \quad (42.4)$$

входящую в выражение для энергии, можно составить из двух целых чисел $n+1$ различными способами, и, следовательно, общее решение имеет вид линейной комбинации

$$u_n(x, y) = \sum_{n_1=0}^n A_{n_1} f_{n_1}(x) f_{n-n_1}(y), \quad (42.5)$$

где

$$\sum_{n_1=0}^n |A_{n_1}|^2 = 1. \quad (42.6)$$

6. В полярных координатах потенциал зависит только от r и здесь также допустимо разделение переменных:

$$u(r, \varphi) = v(r) e^{iM\varphi}, \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (42.7)$$

Это приводит к дифференциальному уравнению

$$\left(v'' + \frac{1}{r} v' - \frac{M^2}{r^2} v \right) + (k^2 - \lambda^2 r^2) v = 0,$$

первая скобка в левой части которого получилась из лапласиана. После подстановки

$$v = r^{|M|} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} F(r)$$

для функции $F(r)$ получается дифференциальное уравнение

$$F'' + \left(\frac{2|M|+1}{r} - 2\lambda r \right) F' - [2\lambda(|M|+1) - k^2] F = 0,$$

которое с помощью замены независимой переменной r на

$$t = \lambda r^2$$

преобразуется в уравнение Куммера

$$t \frac{d^2 F}{dt^2} + [(|M|+1) - t] \frac{dF}{dt} - \frac{1}{2} \left[(|M|+1) - \frac{k^2}{2\lambda} \right] F = 0.$$

Решением этого уравнения, регулярным при $t=0$, является вырожденный гипергеометрический ряд

$$F(t) = {}_1F_1(a, |M|+1; t),$$

где

$$a = \frac{1}{2} (|M| + 1) - \frac{k^2}{4\lambda}. \quad (42.8)$$

При больших значениях t этот ряд расходится как e^t , что делает нормировку решения невозможной. Только в том случае, если

$$a = -n_r, \quad \text{где } n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (42.9)$$

вырожденный гипергеометрический ряд обрывается, превращаясь в полином, и волновую функцию можно нормировать. В таком случае имеем

$$u_{n_r, m}(r, \varphi) = C_{n_r, m} r^{|M|} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} {}_1F_1(-n_r, |M| + 1; \lambda r^2) e^{iM\varphi} \quad (42.10)$$

и

$$E = \hbar\omega (|M| + 1 + 2n_r). \quad (42.11)$$

Так же, как и в случае равенства (42.4), можно положить

$$|M| + 2n_r = n$$

и снова подсчитать кратность вырождения, для которой получается то же самое значение, что и выше.

в. Сравнение результатов. Каждое решение (42.10), с одной стороны, есть собственная функция оператора проекции момента на ось, перпендикулярную плоскости движения,

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

принадлежащая собственному значению $\hbar M$:

$$L_z u_{n_r, m} = \hbar M u_{n_r, m}. \quad (42.12)$$

С другой стороны, за исключением основного состояния, отдельные сомножители в волновой функции, полученные разделением переменных в прямоугольных декартовых координатах, не являются собственными функциями оператора момента. Однако можно найти такие значения постоянных A_{n_i} в формуле (42.5), чтобы получающаяся линейная комбинация вырожденных функций сводилась к выражению вида (42.10). Ниже приведено несколько примеров, относящихся к первым трем низшим состояниям; в правильности соответствующих формул можно убедиться непосредственной проверкой.

$n = 0$ (основное состояние, невырожденное); $n_r = 0$, $M = 0$, $n = 0$, $E = \hbar\omega$,

$$u_{0,0}(r, \varphi) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} = u_0(x) u_0(y).$$

$n=1$ (дважды вырожденные состояния); $n_r=0$, $M=\pm 1$,
 $n=1$, $E=2\hbar\omega$,

$$u_{0, \pm 1}(r, \varphi) = \frac{\lambda}{\sqrt{\pi}} r e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} e^{\pm i\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_1(x) u_0(y) \pm i u_0(x) u_1(y)].$$

$n=2$ (трижды вырожденные состояния); $n_r=1$, $M=0$ и
 $n_r=0$, $M=\pm 2$, $E=3\hbar\omega$,

$$\begin{aligned} u_{1,0}(r, \varphi) &= \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} (1 - \lambda r^2) e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [u_2(x) u_0(y) + u_0(x) u_2(y)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_{0, \pm 2}(r, \varphi) &= \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi}} \lambda r^2 e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} e^{\pm 2i\varphi} = \\ &= \frac{1}{2} [u_0(x) u_2(y) - u_2(x) u_0(y) \pm i\sqrt{2} u_1(x) u_1(y)]. \end{aligned}$$

Замечание. Полученные здесь результаты следует сравнить с результатами задач 65 и 66, где рассмотрен трехмерный изотропный осциллятор.

Задача 43. Эффект Штарка для двумерного ротатора

В плоскости вращается жесткий ротатор с моментом инерции Θ и электрическим дипольным моментом p . Исследовать влияние однородного электрического поля \mathcal{E} , направленного по оси x , на уровни энергии ротатора.

Решение. Невозмущенный ротатор описывается уравнением Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2\Theta} \frac{d^2 u}{d\varphi^2} = E u. \quad (43.1)$$

Собственные функции и собственные значения соответственно имеют вид

$$|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad m=0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (43.2)$$

и

$$E_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2\Theta}. \quad (43.3)$$

Возмущающий потенциал

$$V(\varphi) = -p\mathcal{E} \cos \varphi \quad (43.4)$$

достигает минимума ($-p\mathcal{E}$) при $\varphi=0$ и максимума ($+p\mathcal{E}$) при $\varphi=\pi$. В первом порядке сдвиг невозмущенных уровней (43.3) определяется формулой

$$\Delta_1 E_m = \langle m | V | m \rangle = -\frac{p\mathcal{E}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi} \cos \varphi e^{im\varphi} d\varphi.$$

Так как интеграл в последнем выражении обращается в нуль, то

$$\Delta_1 E_m = 0. \quad (43.5)$$

Эффект Штарка второго порядка, пропорциональный \mathcal{E}^2 , вычисляется по формуле

$$\Delta_2 E_m = \sum_{m' \neq m} \frac{|\langle m' | V | m \rangle|^2}{E_m - E_{m'}}. \quad (43.6)$$

Фигурирующие в этой сумме недиагональные матричные элементы V равны

$$\begin{aligned} \langle m' | V | m \rangle &= -\frac{p\mathcal{E}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \cos \varphi \, d\varphi = \\ &= -\frac{1}{2} p\mathcal{E} (\delta_{m', m+1} + \delta_{m', m-1}). \end{aligned} \quad (43.7)$$

Таким образом, сумма (43.6) состоит всего-навсего из двух слагаемых с $m' = m \pm 1$:

$$\Delta_2 E_m = \frac{1}{4} p^2 \mathcal{E}^2 \frac{2\Theta}{\hbar^2} \left[\frac{1}{m^2 - (m-1)^2} + \frac{1}{m^2 - (m+1)^2} \right],$$

или

$$\Delta_2 E_m = \mathcal{E}^2 \cdot \frac{p^2 \Theta}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{4m^2 - 1}. \quad (43.8)$$

Собственные функции в этом приближении определяются по общей формуле

$$u_m = |m\rangle + \sum_{m' \neq m} |m'\rangle \frac{\langle m' | V | m \rangle}{E_m - E_{m'}}, \quad (43.9)$$

где сумма опять-таки содержит только два слагаемых:

$$u_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ e^{im\varphi} + \frac{1}{2} p\mathcal{E} \left[\frac{1}{2m+1} e^{i(m+1)\varphi} - \frac{1}{2m-1} e^{i(m-1)\varphi} \right] \right\}. \quad (43.10)$$

В том же приближении для относительной вероятности различных ориентаций диполя получаем

$$|u_m|^2 = 1 - \frac{2p\mathcal{E}}{4m^2 - 1} \cos \varphi. \quad (43.11)$$

В случае, когда $m=0$, имеем

$$|u_m|^2 = 1 + 2p\mathcal{E} \cos \varphi,$$

т. е. вероятность обнаружить диполь, ориентированный по полю ($\varphi=0$), максимальна, а против поля ($\varphi=\pi$) минимальна. Этот результат, как очевидно, соответствует статической ориентации диполя в классической теории. Если же $m \neq 0$, то у дополнительного слагаемого в формуле (43.11) изменится знак и поведение диполя будет иметь противоположный характер. Этот результат также можно уяснить с помощью классических модельных представлений: при своем вращении диполь проходит поло-

жение $\varphi = 0$, где потенциал минимален, с большей скоростью, чем противоположное положение. Следовательно, если сделать большую серию статистически независимых моментальных снимков, то на них диполь чаще будет обнаружен вблизи положения $\varphi = \pi$, чем вблизи положения $\varphi = 0$.

Замечание 1. Состояния $|m\rangle$ и $|-m\rangle$ вырождены, однако нет никакой необходимости использовать вместо самих волновых функций $|m\rangle$ и $|-m\rangle$ их линейную комбинацию

$$|\xi, |m\rangle = \alpha_{\xi, |m|} |m\rangle + \beta_{\xi, |m|} |-m\rangle, \quad \xi = 1, 2.$$

Это объясняется тем, что матричный элемент энергии возмущения $\langle -m | V | m \rangle$ равен нулю, и, следовательно, возмущение не смешивает указанные пары вырожденных состояний.

Замечание 2. Если задать магнитное поле \mathcal{H} , направленное перпендикулярно плоскости движения ротатора, то в гамильтониане появится дополнительный член, обусловленный энергией взаимодействия

$$V_{\text{маг}} = -\mathcal{M} \cdot \mathcal{H},$$

где \mathcal{M} — магнитный момент ротатора, связанный с его моментом количества движения соотношением

$$\mathcal{M} = \frac{e}{2Mc} \mathbf{L},$$

а M и e — масса и заряд ротатора соответственно. Таким образом,

$$V_{\text{маг}} = -\frac{e}{2Mc} \mathcal{H} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} = i\mu \mathcal{H} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \mu = \frac{e\hbar}{2Mc}$$

и уравнение Шредингера (43.1) теперь заменится уравнением

$$-\frac{\hbar^2}{2\Theta} \frac{d^2 u}{d\varphi^2} + i\mu \mathcal{H} \frac{du}{d\varphi} = Eu.$$

Решениями последнего по-прежнему являются функции (43.2), однако принадлежат они другим собственным значениям:

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2\Theta} m^2 - \mu \mathcal{H} m.$$

Эти собственные значения уже более не вырождены по отношению к знаку m (эффект Зеемана на плоскости).

Задача 44. Ион молекулы водорода

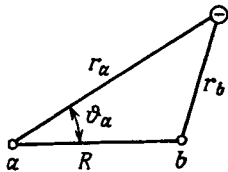
Получить приближенное значение энергии диссоциации для реакции $H_2^+ \rightarrow H + H^+$, взяв электронные волновые функции в виде линейной комбинации функций

$$|a\rangle = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\gamma r_a} \quad \text{и} \quad |b\rangle = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\gamma r_b}, \quad (44.1)$$

где r_a и r_b (фиг. 30) — расстояния между электроном и протонами, расположенными на фиксированном расстоянии R друг от друга. Параметр γ считать вариационным параметром Ритца. Определить

равновесное расстояние R_0 между протонами и в дальнейшем учесть нулевую энергию их колебаний.

Решение. Сначала будем считать, что положения двух протонов фиксированы и расстояние между ними равно R (приближение Борна—Оппенгеймера). В этом случае уравнение Шредингера для электрона в атомных единицах принимает вид



Фиг. 30.

$$Hu \equiv -\frac{1}{2} \nabla^2 u - \left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} \right) u = E_e u, \quad (44.2)$$

где E_e — энергия электрона. При этом энергия молекулы для фиксированного положения ядер будет равна

$$E_{\text{мол}} = \frac{1}{R} + E_e. \quad (44.3)$$

Мы будем пользоваться вариационным методом, согласно которому последнее выражение должно иметь минимально возможное значение:

$$E_{\text{мол}} = \langle u | H | u \rangle + \frac{1}{R} = \text{Минимум} \quad (44.4)$$

при условии

$$\langle u | u \rangle = 1. \quad (44.5)$$

Рассмотрим линейную комбинацию

$$u = \alpha |a\rangle + \beta |b\rangle, \quad (44.6)$$

где функция $|a\rangle$ так же зависит от переменной r_a , как функция $|b\rangle$ от переменной r_b . С учетом нормировки наших функций имеем

$$\langle a | a \rangle = 1, \quad \langle b | b \rangle = 1, \quad \langle a | b \rangle = \langle b | a \rangle = S, \quad (44.7)$$

где через S обозначили так называемый *интеграл перекрытия*. Теперь выражения (44.4) и (44.5) можно записать в более развернутом виде

$$E_{\text{мол}} = (\alpha^2 + \beta^2) \langle a | H | a \rangle + 2\alpha\beta \langle b | H | a \rangle + \frac{1}{R} = \text{Минимум} \quad (44.8)$$

и

$$\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta S = 1. \quad (44.9)$$

Из соображений симметрии непосредственно очевидно, что имеется два решения — симметричное

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}, \quad E_e = \frac{\langle a | H | a \rangle + \langle b | H | a \rangle}{1+S} \quad (44.10)$$

и антисимметричное

$$\alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}, \quad E_e = \frac{\langle a | H | a \rangle - \langle b | H | a \rangle}{1-S}. \quad (44.11)$$

Симметричное решение принадлежит более низкому энергетическому уровню и, таким образом, соответствует основному состоянию молекулы, поэтому в дальнейшем мы ограничимся рассмотрением соотношений (44.10).

Для нормированных функций $|a\rangle$ и $|b\rangle$, определенных соотношениями (44.1), непосредственное вычисление дает

$$H|a\rangle = \left\{ -\frac{1}{2}\gamma^2 + \frac{\gamma-1}{r_a} - \frac{1}{r_b} \right\} |a\rangle,$$

поэтому

$$\langle a|H|a\rangle = \frac{\gamma^3}{\pi} \int e^{-2\gamma r_a} \left(-\frac{1}{2}\gamma^2 + \frac{\gamma-1}{r_a} - \frac{1}{r_b} \right) d\tau, \quad (44.12)$$

$$\langle b|H|a\rangle = \frac{\gamma^3}{\pi} \int e^{-\gamma(r_a+r_b)} \left(-\frac{1}{2}\gamma^2 + \frac{\gamma-1}{r_a} - \frac{1}{r_b} \right) d\tau. \quad (44.13)$$

Вводя обозначения

$$\mathcal{E} = \frac{\gamma^3}{\pi} \int \frac{e^{-2\gamma r_a}}{r_b} d\tau, \quad \mathcal{F} = \frac{\gamma^3}{\pi} \int \frac{e^{-\gamma(r_a+r_b)}}{r_b} d\tau \quad (44.14)$$

и учитывая, что в силу определения (44.7)

$$S = \frac{\gamma^3}{\pi} \int e^{-\gamma(r_a+r_b)} d\tau, \quad (44.15)$$

после несложных преобразований получаем

$$\langle a|H|a\rangle = -\frac{1}{2}\gamma^2 + \gamma(\gamma-1) - \mathcal{E} \quad (44.16)$$

и

$$\langle b|H|a\rangle = -\frac{1}{2}\gamma^2 S + (\gamma-2)\mathcal{F}, \quad (44.17)$$

поэтому

$$E_{\text{мод}} = -\frac{1}{2}\gamma^2 + \frac{\gamma(\gamma-1) - \mathcal{E} + (\gamma-2)\mathcal{F}}{1+S} + \frac{1}{R}. \quad (44.18)$$

Нам осталось вычислить интегралы \mathcal{E} , \mathcal{F} и S . Так называемый кулоновский интеграл \mathcal{E} характеризует кулоновское притяжение между протоном b и „облаком“ отрицательного заряда, которое окружает протон a и описывается волновой функцией $|a\rangle$. Этот интеграл можно вычислить, воспользовавшись разложением (см. фиг. 30):

$$\frac{1}{r_b} = \begin{cases} \frac{1}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r_a}{R} \right)^n P_n(\cos \vartheta_a) & \text{при } r_a < R, \\ \frac{1}{r_a} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{R}{r_a} \right)^n P_n(\cos \vartheta_a) & \text{при } r_a > R. \end{cases}$$

Из этого разложения только член с $n=0$ дает вклад в интеграл \mathcal{E} , вычисление которого теперь тривиально:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{R} [1 - (1 + \gamma R) e^{-2\gamma R}]. \quad (44.19)$$

Интеграл \mathcal{E} называется *обменным интегралом*. Он характеризует обменную энергию, являющуюся следствием симметризации собственных функций (замена электрона, находящегося вблизи a , электроном, находящимся вблизи b). Обменная энергия не имеет классического аналога. Обменный интеграл \mathcal{E} можно вычислить, перейдя к вытянутым эллипсоидальным координатам с фокусами в точках, где находятся протоны. Для этого надо положить

$$r_a = \frac{R}{2} (\xi + \eta), \quad r_b = \frac{R}{2} (\xi - \eta),$$

а в качестве третьей координаты наряду с ξ и η использовать угол поворота φ вокруг оси молекулы. В этих координатах элемент объема равен

$$d\tau = \left(\frac{R}{2}\right)^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi,$$

а область интегрирования определяется неравенствами $1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta \leq +1$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Такой же способ можно применить и для вычисления интеграла перекрытия S . Соответствующие результаты имеют вид

$$\mathcal{E} = \gamma(1 + \gamma R) e^{-\gamma R} \quad (44.20)$$

и

$$S = \left(1 + \gamma R + \frac{1}{3} \gamma^2 R^2\right) e^{-\gamma R}. \quad (44.21)$$

Если теперь в соответствии с формулой (44.18) записать энергию молекулы $E_{\text{мол}}$, то она будет зависеть от двух параметров γ и R . Для дальнейшего вместо γ и R в качестве параметров Ритца, минимизирующих энергию, удобнее использовать величины γ и

$$\rho = \gamma R. \quad (44.22)$$

Подставив в формулу (44.18) вместо S выражение (44.21), а вместо \mathcal{E} и \mathcal{E}' соответственно выражения

$$\mathcal{E}' = \frac{1}{\rho} [1 - (1 + \rho) e^{-\rho}] \quad (44.23)$$

и

$$\mathcal{E} = (1 + \rho) e^{-\rho} \quad (44.24)$$

(все три выражения зависят только от параметра ρ), получим

$$E_{\text{мол}} = -\frac{1}{2} \gamma^2 + \frac{\gamma(\gamma-1) - \gamma \mathcal{E}' + \gamma(\gamma-2) \mathcal{E}}{1+S} + \frac{\gamma}{\rho}. \quad (44.25)$$

Последнее выражение можно представить в виде

$$E_{\text{мол}} = f(\rho) \gamma^2 + g(\rho) \gamma$$

и из соотношения

$$\frac{\partial E_{\text{мол}}}{\partial \gamma} = 2\gamma f(\rho) + g(\rho) = 0$$

определить оптимальное значение параметра γ . В результате имеем

$$\gamma = -\frac{g(\rho)}{2f(\rho)}$$

и, следовательно,

$$E_{\text{мол}} = -\frac{g^2(\rho)}{4f(\rho)}.$$

Теперь мы должны определить минимум этого выражения, рассматривая его как функцию переменной ρ .

Численные расчеты не представляют труда, хотя и требуют известного времени. Основные результаты таких расчетов приводятся в нижеследующей таблице.

| $\gamma R = \rho$ | γ | $-E_{\text{мол}}$ | R |
|-------------------|----------|-------------------|-------|
| 1,0 | 0,832 | 0,300 | 1,200 |
| 1,5 | 1,113 | 0,500 | 1,345 |
| 2,0 | 1,216 | 0,573 | 1,645 |
| 2,3 | 1,235 | 0,5848 | 1,86 |
| 2,5 | 1,240 | 0,5865 | 2,02 |
| 2,8 | 1,228 | 0,5827 | 2,28 |
| 3,0 | 1,216 | 0,578 | 2,47 |
| 3,5 | 1,180 | 0,560 | 2,96 |

Минимум можно определить с еще большей степенью точности, чем это следует непосредственно из таблицы, если аппроксимировать энергию параболой, проходящей через три точки $\rho = 2,3, 2,5$ и $2,8$. Путем интерполяции находим

$$E_{\text{мол}} = 0,0380 (R - 2,08)^2 - 0,5866. \quad (44.26)$$

Таким образом, равновесное расстояние, соответствующее минимуму энергии, равно

$$R_0 = 2,08 \text{ ат. ед.} = 1,10 \text{ \AA},$$

а глубина потенциальной ямы составляет

$$V_0 = -0,5866 \text{ ат. ед.}$$

Чтобы найти энергию диссоциации D , мы должны учесть нулевую энергию колебаний молекулы, $\frac{1}{2}\hbar\omega$, соответствующую осцилляторному ядерному потенциалу (44.26), и вычесть из энергии связи молекулы энергию связи атома водорода, которая равна $\frac{1}{2}$ ат. ед. Таким образом

$$D = -\frac{1}{2} - \left(V_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega \right) = 0,0866 - \frac{1}{2}\hbar\omega = 2,36\text{эВ} - \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Грубую оценку нулевой энергии колебаний можно получить, ограничившись гармоническим приближением (44.26). Для этого, очевидно, следует положить $\frac{1}{2}M\omega^2 = 0,0380$ (см. задачу 30), где M — приведенная масса колеблющихся протонов. Отсюда получаем $\hbar\omega = 0,00913$ ат. ед., так что нулевая энергия колебаний равна

$$\frac{1}{2} \hbar\omega = 0,00457 \text{ ат. ед.} = 0,124 \text{ эВ.}$$

Отсюда для энергии диссоциации окончательно находим $D = 2,24$ эВ. Это приближенное значение следует сравнить с экспериментальным значением $D_{\text{эксп}} = 2,65$ эВ. Такое согласие можно считать хорошим, особенно если учесть, что в нашей теории приближаемой величиной является не энергия диссоциации D , а глубина потенциальной ямы V_0 ; экспериментальное же значение V_0 равно $-0,6017$, и, следовательно, теоретическое значение $-0,5866$ содержит ошибку, составляющую всего-навсего 2,6%.

Задача 45. Наклонное падение плоской волны

На прямоугольную потенциальную ступеньку

$$V = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$

наклонно падает плоская волна. Найти законы отражения и преломления, а также вычислить интенсивности пучков отраженных и прошедших частиц. Особо рассмотреть случай полного отражения.

Решение. Всюду в дальнейшем будем пользоваться сокращенными обозначениями

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} = K^2. \quad (45.1)$$

Предположим сначала, что $V_0 < E$, т. е. что величина K действительная (сюда автоматически включается случай отрицательных V_0). В полупространстве $x < 0$ решение уравнения Шредингера при стандартной нормировке имеет вид

$$u = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + R e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}, \quad x < 0, \quad (45.2a)$$

где \mathbf{k} (k_x, k_y, k_z) — волновой вектор падающей волны, а R и \mathbf{k}' (k'_x, k'_y, k'_z) — соответственно амплитуда и волновой вектор отраженной волны. В полупространстве $x > 0$ имеется только прошедшая волна:

$$u = T e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad x > 0, \quad (45.2b)$$

с амплитудой T и волновым вектором \mathbf{K} (K_x, K_y, K_z). Упомянутые волновые векторы удовлетворяют соотношениям

$$k^2 = k'^2 = k^2, \quad K^2 = K^2. \quad (45.3)$$

На поверхности $x=0$ функции u , определяемые формулами (45.2а) и (45.2б) и зависящие от переменных y и z , должны совпадать; то же самое относится и к их производным du/dx . Отсюда следует, что должны быть равны как их фазы

$$k_y y + k_z z = k'_y y + k'_z z = K_y y + K_z z, \quad (45.4)$$

так и их амплитуды

$$1 + R = T, \quad k_x + Rk'_x = TK_x. \quad (45.5)$$

Прежде всего исследуем уравнения (45.4). Последующие рассуждения можно существенно упростить, если выбрать ось z таким образом, чтобы $k_z = 0$, т. е. направить эту ось перпендикулярно плоскости падения. Тогда, согласно уравнениям (45.4), k'_z и K_z также будут равны нулю, и, следовательно, оба вектора, \mathbf{k}' и \mathbf{K} , будут лежать в плоскости xy . На фиг. 31 показано взаимное расположение волновых векторов и определены используемые ниже углы α, α', β . С учетом этих определений уравнения (45.4) принимают вид

$$k \sin \alpha = k \sin \alpha' = K \sin \beta.$$

Из них сразу же следует закон отражения, $\alpha = \alpha'$, и закон преломления Снеллиуса,

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{K}{k}, \quad (45.6a)$$

позволяющий тем же путем, что и в оптике, определить показатель преломления:

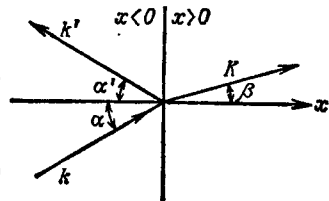
$$n = \frac{K}{k} = \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}. \quad (45.6b)$$

Теперь из уравнений (45.5) найдем амплитуды R и T :

$$\begin{aligned} R &= \frac{K_x - k_x}{k'_x - K_x} = \frac{K \cos \beta - k \cos \alpha}{-k \cos \alpha - K \cos \beta} = -\frac{\sin(\alpha - \beta)}{\sin(\alpha + \beta)}, \\ T &= \frac{k'_x - k_x}{k'_x - K_x} = \frac{-k \cos \alpha - k \cos \alpha}{-k \cos \alpha - K \cos \beta} = \frac{2 \cos \alpha \sin \beta}{\sin(\alpha + \beta)}. \end{aligned} \quad (45.7)$$

Найденные амплитуды позволяют вычислить интенсивности пучков, которые мы определим как плотности потоков соответствующих частиц:

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2im} (u^* \nabla u - u \nabla u^*). \quad (45.8)$$



Фиг. 31. К определению волновых векторов и углов при наклонном падении.

В полупространстве $x < 0$ в силу формулы (45.2а) имеем

$$\nabla u = i\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + R i\mathbf{k}'e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$$

и, следовательно,

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{m} [\mathbf{k} + R^2\mathbf{k}' + R(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cos(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{r}],$$

или более подробно

$$\begin{aligned} s_x &= \frac{\hbar}{m} k \cos \alpha (1 - R^2), \\ s_y &= \frac{\hbar}{m} k \sin \alpha [1 + R^2 + 2R \cos(2kx \cos \alpha)]. \end{aligned} \quad (45.9)$$

По другую сторону потенциальной ступеньки ($x > 0$) формула (45.2б) дает

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{m} T^2 \mathbf{K},$$

или более подробно

$$s_x = \frac{\hbar}{m} K \cos \beta \cdot T^2; \quad s_y = \frac{\hbar}{m} K \sin \beta \cdot T^2. \quad (45.10)$$

Из непрерывности плотности потока частиц следует, что компонента s_x должна иметь одно и то же значение по обе стороны плоскости $x = 0$, где потенциал претерпевает разрыв:

$$k \cos \alpha (1 - R^2) = K \cos \beta \cdot T^2.$$

Используя формулы (45.6а) и (45.7), нетрудно показать, что приведенное выше соотношение действительно является тождеством. Что же касается компоненты s_y , то на нее не налагается никаких ограничений подобного рода, если, конечно, не считать, что она не должна зависеть от координаты y . Интересно, однако, отметить, что благодаря интерференции между падающей и отраженной волнами s_y зависит от координаты x . Эта периодическая зависимость от расстояния до потенциальной ступеньки нигде не приводит к изменению знака, так как выражение, стоящее в квадратных скобках в формуле (45.9), осциллирует между значениями $(1 - R)^2$ и $(1 + R)^2$, но оба они положительны.

Если произвести усреднение по области протяженностью в несколько длин волн, интерференционный член в результате усреднения пропадет и выражения для падающего, отраженного и прошедшего потоков примут соответственно вид

$$\mathbf{s}_0 = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}; \quad \mathbf{s}_r = \frac{\hbar}{m} R^2 \mathbf{k}'; \quad \mathbf{s}_t = \frac{\hbar}{m} T^2 \mathbf{K}. \quad (45.11)$$

Абсолютные величины этих векторов называют интенсивностями, а об отношениях $s_r/s_0 = R^2$ и $s_t/s_0 = nT^2$ говорят, заимствуя терминологию из оптики, как о коэффициентах отражения и прохождения соответственно.

Полное отражение имеет место, когда $V_0 > E$, т. е. когда величина K в формуле (45.1) является чисто мнимой:

$$K = ix.$$

Уравнения (45.4) остаются в силе и в данном случае, поэтому $K_y = k \sin \alpha$ и $K_z = 0$, так что

$$K_x^2 = K^2 - K_y^2 - K_z^2 = -(\kappa^2 + k^2 \sin^2 \alpha).$$

Следовательно, величина K_x^2 отрицательная, а $K_x = ix_x$ — чисто мнимое число. Уравнения (45.5) в рассматриваемом случае принимают вид

$$1 + R = T, \quad k_x + Rk'_x = Tix_x. \quad (45.5a)$$

Закон отражения остается прежним, а о законе преломления говорить, конечно, не имеет смысла. Что касается амплитуд, то вместо выражений (45.7) теперь имеем выражения

$$R = \frac{ix_x - k \cos \alpha}{-k \cos \alpha - ix_x}, \quad T = \frac{-2k \cos \alpha}{-k \cos \alpha - ix_x}. \quad (45.7a)$$

Отсюда следует, что $|R|^2 = 1$ и, таким образом, интенсивность отраженной волны равна интенсивности падающей волны, что присуще в случае полного отражения волнам любой природы.

Замечание. Решение этой задачи во многом аналогично решению соответствующей оптической задачи. Однако из-за векторной природы световых волн теория отражения и преломления света значительно сложнее простого случая скалярной волны, с которым мы имели дело в нашей задаче. Заметим, что наша формула (45.7) соответствует формуле Френеля для компоненты электрического вектора, перпендикулярной плоскости падения.

Задача 46. Симметричный волчок

Вращение весьма большого класса молекул можно трактовать как вращение твердого тела, если не принимать во внимание колебания ядер и не учитывать движение электронов. Пусть молекула имеет форму симметричного волчка с моментом инерции C относительно оси молекулы и моментом инерции A относительно любой из перпендикулярных осей, проходящих через ее центр масс. Исходя из классической функции Гамильтона, получить уравнение Шредингера для свободных вращений и определить собственные значения энергии.

Решение. Если положение оси волчка задается двумя сферическими углами ϑ и φ , а поворот волчка вокруг этой оси углом ψ , то классическое выражение для кинетической энергии имеет вид¹⁾:

$$T_{\text{кл}} = \frac{1}{2} [A(\dot{\varphi}^2 \sin^2 \vartheta + \dot{\vartheta}^2) + C(\dot{\varphi} \cos \vartheta + \dot{\psi})^2]. \quad (46.1)$$

¹⁾ Вывод этого выражения можно найти в учебниках по классической механике. См., например, Flügge S., Lehrbuch der theoretischen Physik, Bd. II, S. 50, 75. (См. Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М., Механика, Физматгиз, 1958, § 32 и 35.— Прим. ред.)

В этой задаче три эйлеровых угла ϑ , φ , ψ являются обобщенными координатами, а кинетическая энергия $T_{\text{кд}}$ представляет собой квадратичную форму в переменных $\dot{\vartheta}$, $\dot{\varphi}$ и $\dot{\psi}$, поэтому для написания соответствующего квантовомеханического оператора мы можем воспользоваться методом, развитым в задаче 13. Определенный там метрический тензор в нашем случае имеет следующие ковариантные компоненты:

$$\begin{aligned} g_{\vartheta\vartheta} &= A, & g_{\vartheta\varphi} &= 0, & g_{\vartheta\psi} &= 0, \\ g_{\varphi\vartheta} &= 0, & g_{\varphi\varphi} &= A \sin^2 \vartheta + C \cos^2 \vartheta, & g_{\varphi\psi} &= C \cos \vartheta, \\ g_{\psi\vartheta} &= 0, & g_{\psi\varphi} &= C \cos \vartheta, & g_{\psi\psi} &= C, \end{aligned} \quad (46.2)$$

а соответствующий ему определитель равен

$$g = A^2 C \sin^2 \vartheta. \quad (46.3)$$

Контравариантные компоненты метрического тензора вычисляются с помощью формулы $g^{ik} = G_{ik}/g$ и имеют вид

$$\begin{aligned} g^{\vartheta\vartheta} &= \frac{1}{A}, & g^{\vartheta\varphi} &= 0, & g^{\vartheta\psi} &= 0, \\ g^{\varphi\vartheta} &= 0, & g^{\varphi\varphi} &= \frac{1}{A \sin^2 \vartheta}, & g^{\varphi\psi} &= -\frac{\cos \vartheta}{A \sin^2 \vartheta}, \\ g^{\psi\vartheta} &= 0, & g^{\psi\varphi} &= -\frac{\cos \vartheta}{A \sin^2 \vartheta}, & g^{\psi\psi} &= \frac{1}{C} + \frac{\cos^2 \vartheta}{A \sin^2 \vartheta}. \end{aligned} \quad (46.4)$$

Оператор кинетической энергии теперь можно получить путем непосредственного расчета по формуле (13.11). Это дает

$$\begin{aligned} T = -\frac{\hbar^2}{2A} & \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2 \cos \vartheta}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \psi} + \right. \\ & \left. + \left(\frac{A}{C} + \frac{\cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta} \right) \frac{\partial^2}{\partial \psi^2} \right]. \end{aligned} \quad (46.5)$$

Так как в отсутствие внешних сил оператор Гамильтона совпадает с оператором кинетической энергии T , то уравнение Шредингера для свободно вращающегося волчка записывается в виде

$$Tu = Eu. \quad (46.6)$$

Уравнение (46.6) с оператором T , определенным равенством (46.5), можно решить методом разделения переменных:

$$u = f(\vartheta) e^{i(M\varphi + K\psi)}. \quad (46.7)$$

Чтобы волновая функция u была однозначной, квантовые числа M и K должны быть целыми, так как областью изменения и угла φ и угла ψ является интервал длиной 2π . Эти квантовые числа имеют простой физический смысл: $\hbar M$ — проекция момента количества движения волчка на неподвижную в пространстве ось z (полярная ось сферической системы координат), а $\hbar K$ — проекция момента количества движения волчка на его ось симметрии.

После подстановки выражения (46.7) в уравнение (46.6) мы для функции $f(\vartheta)$ получаем дифференциальное уравнение вида

$$-\frac{\hbar^2}{2A} \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d}{d\vartheta} \right) - \frac{M^2}{\sin^2 \vartheta} + \frac{2MK \cos \vartheta}{\sin^2 \vartheta} - \left(\frac{A}{C} + \frac{\cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta} \right) K^2 \right] f = Ef. \quad (46.8)$$

Дифференциальное уравнение (46.8) можно записать несколько по-иному, если ввести обозначение

$$\lambda = \frac{2A}{\hbar^2} E - K^2 \left(\frac{A}{C} - 1 \right) \quad (46.9)$$

и новую переменную

$$s = \frac{1}{2} (1 + \cos \vartheta) = \cos^2 \frac{\vartheta}{2}, \quad 0 \leq s \leq 1. \quad (46.10)$$

Имеем

$$s(1-s) \frac{d}{ds} \left[s(1-s) \frac{df}{ds} \right] + \left[\lambda s(1-s) - \frac{1}{4} (M+K)^2 + MKs \right] f = 0. \quad (46.11)$$

Вместо квантовых чисел M и K удобно ввести положительные числа p и q :

$$p = \frac{1}{2} |M+K|, \quad q = \frac{1}{2} |M-K|, \quad (46.12)$$

удовлетворяющие соотношениям

$$\frac{1}{4} (M+K)^2 = p^2, \quad MK = p^2 - q^2.$$

Теперь уравнение (46.11) с помощью подстановки

$$f(s) = s^p (1-s)^q F(s) \quad (46.13)$$

легко приводится к гипергеометрическому уравнению

$$s(1-s) F'' + [(2p+1) - (2p+2q+2)s] F' - [(p+q)(p+q+1) - \lambda] F = 0. \quad (46.14)$$

Регулярное в точке $s=0$ ($\vartheta=\pi$) решение этого уравнения имеет вид

$$F = {}_2F_1(p+q+1+J, \quad p+q-J, \quad 2p+1; s), \quad (46.15)$$

где

$$\lambda = J(J+1), \quad (46.16)$$

так что теперь выражение для энергии E с учетом формулы (46.9) приобретает вид

$$E = \frac{\hbar^2}{2A} J(J+1) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{C} - \frac{1}{A} \right) K^2. \quad (46.17)$$

Второе решение уравнения (46.14) имеет сингулярность в точке $s=0$ ($F \sim s^{-2p}$, $f \sim s^{-p}$), и его можно не рассматривать.

Необходимо подчеркнуть, что величина J не обязана быть целым числом (пока что это всего лишь новое сокращенное обозначение) и формула (46.17) еще не определяет искомые собственные значения. Однако в нашем распоряжении есть еще второе граничное условие. В точке $s = 1$ ($\vartheta = 0$) гипергеометрический ряд (46.15) имеет сингулярность типа $F \sim (1-s)^{-2q}$ и, следовательно, наше решение f ведет себя как $(1-s)^{-q}$; исключением является случай, когда гипергеометрический ряд (46.15) обрывается, что происходит всякий раз, когда либо первый, либо второй аргумент функции (46.15) равен целому отрицательному числу. Поскольку первый аргумент в силу своего определения положителен, в нашем случае должно быть

$$p + q - J = -n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (46.18)$$

при этом функция F становится полиномом n -й степени и волновая функция оказывается конечной для любых физических значений угла. Как следует из формулы (46.12), сумма $p + q$ есть положительное целое число, равное либо $|K|$, либо $|M|$ в зависимости от того, какая из этих величин больше, поэтому величина J , равная сумме $n + p + q$, также есть целое положительное число, всегда превосходящее или в крайнем случае равное большому из чисел $|K|$ и $|M|$. Этот результат выглядит вполне разумным, если понимать под J (хотя мы этого еще не показали) полный момент количества движения волчка, поскольку всякий вектор всегда не меньше любой из своих компонент. Только теперь, после того как выяснен вопрос о допустимых значениях величины J , мы можем сказать, что формула (46.17) является решением поставленной задачи.

В том, что величина J действительно является квантовым числом полного момента количества движения, проще всего убедиться, сопоставив классическое выражение

$$T_{\text{кл}} = \frac{1}{2A} \left[J^2 + \left(\frac{A}{C} - 1 \right) K^2 \right]$$

с квантовой формулой (46.17).

Замечание 1. Собственные функции в стандартных обозначениях имеют вид

$$\mathcal{D}_{MK}^J = \frac{1}{2\pi} e^{i(M\varphi + K\psi)} d_{MK}^J(\vartheta), \quad (46.19)$$

где

$$d_{MK}^J = N_{MK}^J s^p (1-s)^q {}_2F_1(p+q+J+1, p+q-J, 2p+1; s). \quad (46.20)$$

Они нормированы таким образом, что

$$\int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{2\pi} d\psi \left| \mathcal{D}_{MK}^J \right|^2 d\psi = 1 \quad (46.21)$$

и

$$\int_0^{\pi} \sin \vartheta |d'_{MK}|^2 d\vartheta = 1. \quad (46.22)$$

Определенная с помощью последних соотношений нормировочная постоянная N'_{MK} выражается формулой

$$N'_{MK} = \frac{\sqrt{2J+1}}{2(2p)!} \sqrt{\frac{(J+p+q)!(J+p-q)!}{(J-p+q)!(J-p-q)!}}. \quad (46.23)$$

С математической точки зрения эти функции примечательны тем, что матрица \mathcal{D}^J с элементами \mathcal{D}^J_{MK} реализует $(2J+1)$ -мерное представление группы 3-мерных вращений. В этой связи см. также задачу 55.

Замечание 2. Применительно к твердому телу метод построения оператора T [формула (46.5)] нельзя ни в коей мере считать обоснованным: в задаче 13 разбирался исключительно вопрос об обобщенных координатах для системы точечных масс. Более того, в квантовой механике вообще не может быть абсолютно твердого тела, так как последнее понятие предполагает наличие таких ограничивающих внутренние движения связей, которые приводят к бесконечной нулевой энергии. Только путем корректного отделения этих внутренних движений от вращения системы в целом можно решить указанную проблему. Эта программа была выполнена в работе Флюгге и Вейгани [*Flügge S., Weiguny A., Zs. Phys., 171, 171 (1963)*], где было произведено упомянутое отделение внутренних движений и выполнен предельный переход к бесконечно малым колебаниям составляющих систему частиц около их равновесных положений¹⁾.

Что же касается самого выражения (46.5) и квантовой теории симметричного волчка, то они, разумеется, были получены значительно раньше; первой относящейся сюда работой мы обязаны Рейхе [*Reiche F., Zs. Phys., 39, 444 (1926)*].

В. Момент количества движения

Задача 47. Бесконечно малые вращения

Показать, что результат преобразования скалярной функции $f(\mathbf{r})$ при бесконечно малом вращении системы координат простым образом выражается через операторы момента количества движения.

Решение. Пусть поворот системы координат описывается формулами

$$\mathbf{r}' = R\mathbf{r}, \quad R = 1 + A, \quad (47.1a)$$

где R и A — трехрядные матрицы, причем

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_x & -\epsilon_y \\ -\epsilon_x & 0 & \epsilon_x \\ \epsilon_y & -\epsilon_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (47.16)$$

¹⁾ Впервые эта проблема рассматривалась в работе Уилкера [*Walker H., Zs. Phys., 101, 95 (1936)*].

Фигурирующие здесь бесконечно малые величины ϵ_j представляют собой углы поворота относительно трех осей x, y, z . Заметим, что обратное преобразование можно получить, либо изменяя знак всех трех величин ϵ_j , либо переходя к транспонированной матрице \tilde{A} . Следовательно,

$$\tilde{A} = -A. \quad (47.1в)$$

В результате преобразования (47.1а)—(47.1в) функция $f(\mathbf{r})$ перейдет в функцию $f'(\mathbf{r}')$ от новых координат. Эту функцию можно выразить через старые координаты \mathbf{r} , воспользовавшись разложением в ряд Тейлора:

$$f'(\mathbf{r}') = f'(\mathbf{r}) + (\delta\mathbf{r} \cdot \nabla) f'(\mathbf{r}), \quad (47.2)$$

где $\delta\mathbf{r} = \mathbf{r}' - \mathbf{r} = A\mathbf{r}$; в (47.2) все члены, содержащие более высокие производные, отброшены. Как следует из формулы (47.1б),

$$A\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \epsilon_z y & -\epsilon_y z \\ -\epsilon_z x & +\epsilon_x z \\ \epsilon_y x & -\epsilon_x y \end{pmatrix}, \quad (47.3)$$

поэтому равенство (47.2) можно записать в виде

$$f'(\mathbf{r}') = f'(\mathbf{r}) + \left[(\epsilon_z y - \epsilon_y z) \frac{\partial}{\partial x} + (-\epsilon_z x + \epsilon_x z) \frac{\partial}{\partial y} + (\epsilon_y x - \epsilon_x y) \frac{\partial}{\partial z} \right] f'(\mathbf{r}).$$

Собирая здесь члены с одинаковыми ϵ_j и вводя операторы момента количества движения

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \text{ и т. д. (циклические перестановки),} \quad (47.4)$$

получаем

$$f'(\mathbf{r}') = f'(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{L}) f'(\mathbf{r}), \quad (47.5)$$

где через $\boldsymbol{\epsilon}$ обозначен вектор с компонентами $\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z$. Так как последний член в выражении (47.5) есть величина бесконечно малая, то здесь мы можем пренебречь различием между $f'(\mathbf{r})$ и $f'(\mathbf{r}')$, поэтому выражению (47.5) можно придать иную форму:

$$f'(\mathbf{r}) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{L}) \right] f'(\mathbf{r}'). \quad (47.6)$$

До сих пор мы не пользовались тем, что функция $f(\mathbf{r})$ является скаляром, т. е. инвариантна по отношению к вращениям:

$$f'(\mathbf{r}') = f(\mathbf{r}). \quad (47.7)$$

Последнее равенство позволяет все величины, входящие в соотношение (47.6), выразить через старые координаты \mathbf{r} , так что окон-

чительно оно принимает вид

$$f'(r) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}) \right] f(r). \quad (47.8)$$

Задача 48. Момент количества движения в сферических координатах

Воспользовавшись результатами предыдущей задачи, выразить компоненты оператора момента количества движения через сферические координаты.

Решение. В равенстве (47.5) мы вместо f' будем писать ψ , так что оно запишется в виде

$$\psi(r') = \left[1 - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}) \right] \psi(r). \quad (48.1)$$

Прежде всего произведем поворот вокруг оси z . Этому повороту соответствует преобразование $r' = r$, $\vartheta' = \vartheta$, $\varphi' = \varphi - \varepsilon_z$. Отсюда с помощью разложения в ряд Тейлора получаем

$$\psi(r') = \psi(r) + (\varphi' - \varphi) \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \left[1 - \varepsilon_z \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \psi(r).$$

С другой стороны, в соответствии с формулой (48.1) имеем

$$\psi(r') = \left[1 - \frac{i}{\hbar} (\varepsilon_z L_z) \right] \psi(r).$$

Сравнение этих выражений дает

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (48.2)$$

Рассмотрим теперь поворот системы координат на угол ε_x вокруг оси x . В этом случае по-прежнему будет $r' = r$, но оба сферических угла ϑ и φ изменятся:

$$\vartheta' = \vartheta + \delta\vartheta, \quad \varphi' = \varphi + \delta\varphi.$$

В прямоугольных координатах рассматриваемый поворот, согласно (47.1а) и (47.1б), описывается формулами

$$x = x', \quad y' = y + \varepsilon_x z, \quad z' = z - \varepsilon_x y.$$

Так как, с одной стороны,

$$z = r \cos \vartheta, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

и

$$z' = r \cos \vartheta' = r (\cos \vartheta - \delta\vartheta \sin \vartheta),$$

а, с другой стороны,

$$z' = z - \varepsilon_x y = r (\cos \vartheta - \varepsilon_x \sin \vartheta \sin \varphi),$$

то из сравнения этих выражений вытекает

$$\delta\vartheta = \varepsilon_x \sin \varphi. \quad (48.3)$$

Аналогичным образом, сравнивая выражения

$$y' = r \sin \vartheta' \sin \varphi' = r (\sin \vartheta \sin \varphi + \delta\vartheta \cos \vartheta \sin \varphi + \delta\varphi \sin \vartheta \cos \varphi)$$

и

$$y' = y + \varepsilon_x z = r (\sin \vartheta \sin \varphi + \varepsilon_x \cos \vartheta),$$

получаем

$$\delta\vartheta \cos \vartheta \sin \varphi + \delta\varphi \sin \vartheta \cos \varphi = \varepsilon_x \cos \vartheta,$$

что с учетом формулы (48.3) для $\delta\vartheta$ дает

$$\delta\varphi = \varepsilon_x \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta. \quad (48.4)$$

Используя формулы (48.3) и (48.4), запишем разложение в ряд Тейлора в виде

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}') &= \psi(\mathbf{r}) + \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \delta\vartheta + \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \delta\varphi = \\ &= \psi(\mathbf{r}) + \varepsilon_x \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Из соотношения (48.1) следует

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_x L_x \psi(\mathbf{r});$$

сравнение этих двух выражений дает

$$L_x = -\frac{\hbar}{i} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (48.5)$$

Рассмотрим, наконец, поворот системы координат на угол ε_y вокруг оси y . Снова обозначим приращения углов ϑ и φ через $\delta\vartheta$ и $\delta\varphi$, которые теперь имеют иные значения, определяющиеся соотношениями

$$\begin{aligned} x' &= r \sin \vartheta' \cos \varphi' = r (\sin \vartheta \cos \varphi + \delta\vartheta \cos \vartheta \cos \varphi - \delta\varphi \sin \vartheta \sin \varphi) = \\ &= x - \varepsilon_y z = r (\sin \vartheta \cos \varphi - \varepsilon_y \cos \vartheta) \quad (48.6a) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} z' &= r \cos \vartheta' = r (\cos \vartheta - \delta\vartheta \sin \vartheta) = \\ &= z + \varepsilon_y x = r (\cos \vartheta + \varepsilon_y \sin \vartheta \cos \varphi). \quad (48.6b) \end{aligned}$$

Из формулы (48.6b) получаем

$$\delta\vartheta = -\varepsilon_y \cos \varphi, \quad (48.7)$$

а из формулы (48.6a) следует

$$\delta\varphi = \varepsilon_y \sin \varphi \operatorname{ctg} \vartheta. \quad (48.8)$$

Таким образом,

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) + \varepsilon_y \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sin \varphi \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi(\mathbf{r}),$$

но последнее выражение должно согласовываться с соотношением

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_y L_y \psi(\mathbf{r}),$$

вытекающим из формулы (48.1), поэтому

$$L_y = -\frac{\hbar}{i} \left(-\cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sin \vartheta \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (48.9)$$

Вместо самих компонент (48.5) и (48.9) обычно удобнее пользоваться их комбинациями:

$$L^+ = L_x + iL_y = -\frac{\hbar}{i} e^{i\varphi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (48.10a)$$

$$L^- = L_x - iL_y = -\frac{\hbar}{i} e^{-i\varphi} \left(i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (48.10б)$$

Выражениями (48.2), (48.5) и (48.9) полностью исчерпывается решение поставленной задачи.

Задача 49. Момент количества движения и оператор Лапласа

Записать оператор L^2 в сферических координатах. Полученное выражение сравнить с оператором Лапласа и с оператором кинетической энергии.

Решение. Используя операторы L^+ и L^- , определенные формулами (48.10a) и (48.10б), можно написать

$$L^2 = \frac{1}{2} (L^+ L^- + L^- L^+) + L_z^2. \quad (49.1)$$

Произведение $L^+ L^-$ равно

$$L^+ L^- = -\hbar^2 e^{i\varphi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{-i\varphi} \left(i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Учитывая перестановочное соотношение

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} e^{-i\varphi} = e^{-i\varphi} \left(-i + \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

позволяющее исключить экспоненту, и принимая во внимание, что

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} \operatorname{ctg} \vartheta = -\frac{1}{\sin^2 \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta},$$

приходим к выражению

$$L^+ L^- = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg}^2 \vartheta \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + i \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (49.2)$$

Аналогичным образом можно найти и оператор $L^- L^+$; от только что найденного соответствующее выражение отличается знаком последнего члена. Таким образом, формула (49.1) теперь дает

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + (1 + \operatorname{ctg}^2 \vartheta) \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right],$$

или

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (49.3)$$

В этой последней записи выражение, стоящее в квадратных скобках, совпадает с выражением для угловой части оператора Лапласа, поэтому можно написать

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2. \quad (49.4)$$

Как известно из классической механики, кинетическую энергию частицы можно представить в виде

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \right).$$

Так как ей соответствует квантовомеханический оператор $(-\hbar^2/2m) \nabla^2$, то равенство (49.4) приводит к соотношению

$$p_r^2 = -\hbar^2 \nabla^2 - \frac{L^2}{r^2} = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right), \quad (49.5)$$

которое показывает, что оператор p_r^2 с точностью до множителя совпадает с радиальной частью оператора Лапласа. Оператор же, соответствующий классическому радиальному импульсу p_r , теперь получается из выражения (49.5) путем факторизации:

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (49.6)$$

В самом деле, последнее выражение, будучи применено дважды, дает правую часть равенства (49.5). Можно показать, что оператор p_r эрмитов (см. задачу 59) и что он и координата r удовлетворяют каноническим перестановочным соотношениям.

Задача 50. Преобразования в гильбертовом пространстве

Показать, что любой квантовомеханический оператор F при бесконечно малом повороте преобразуется в соответствии с формулой

$$F' = U F U^\dagger, \quad (50.1)$$

где унитарный оператор U имеет вид

$$U = 1 - \frac{i}{\hbar} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{L}). \quad (50.2)$$

Пользуясь этим преобразованием, найти коммутаторы L_j с x_k , p_k , L_k и L^2 .

Решение. На основании соотношения (47.8) мы знаем, что всякие скалярные волновые функции ψ и φ преобразуются при поворотах по закону $\psi' = U\psi$ и $\varphi' = U\varphi$, где оператор U определяется равенством (50.2). Всякая измеримая величина (т.е. всякий матричный элемент, получаемый из оператора F) должна быть инвариантна по отношению к выбору системы координат,

поэтому

$$\langle \psi' | F' | \psi' \rangle = \langle \psi | F | \psi \rangle. \quad (50.3)$$

Заменяя здесь ψ' и ψ' , получаем

$$\langle \psi' | F' | \psi' \rangle = \langle U\psi | F' | U\psi \rangle = \langle \psi | U^\dagger F' U | \psi \rangle. \quad (50.4)$$

Сравнивая последнее выражение с правой частью равенства (50.3), находим искомый закон преобразования (50.1).

Подставляя в равенство (50.1) выражение (50.2) и учитывая, что рассматриваемое преобразование является бесконечно малым, получаем

$$F' = F - \varepsilon \cdot [L, F], \quad (50.5)$$

где $[a, b]$ означает, как обычно, квантовую скобку Пуассона:

$$[a, b] = \frac{i}{\hbar} (ab - ba).$$

Если теперь в качестве оператора F взять прямоугольные координаты x, y, z , то, с одной стороны, должны выполняться соотношения

$$\begin{aligned} x' &= x - \varepsilon \cdot [L, x], \\ y' &= y - \varepsilon \cdot [L, y], \\ z' &= z - \varepsilon \cdot [L, z], \end{aligned} \quad (50.6)$$

а с другой стороны, как мы знаем, в соответствии с формулой (47.3) должно быть

$$\begin{aligned} x' &= x + \varepsilon_z y - \varepsilon_y z, \\ y' &= y - \varepsilon_z x + \varepsilon_x z, \\ z' &= z + \varepsilon_y x - \varepsilon_x y. \end{aligned} \quad (50.7)$$

Сравнивая соотношения (50.6) и (50.7), находим

$$\begin{aligned} [L_x, x] &= 0, & [L_y, x] &= z, & [L_z, x] &= -y, \\ [L_x, y] &= -z, & [L_y, y] &= 0, & [L_z, y] &= x, \\ [L_x, z] &= y, & [L_y, z] &= -x, & [L_z, z] &= 0. \end{aligned} \quad (50.8)$$

Компоненты всякого вектора преобразуются по формулам, имеющим такую же структуру, как и формулы (50.7), откуда с необходимостью следует, что и перестановочные соотношения с компонентами оператора момента количества движения должны иметь тот же самый вид, например,

$$[L_x, p_x] = 0, \quad [L_y, p_x] = p_z, \quad [L_z, p_x] = -p_y \quad \text{и т. д.} \quad (50.9)$$

Поскольку момент количества движения сам является вектором, то вышеприведенные соображения относятся и к его собственным компонентам, поэтому

$$[L_x, L_x] = 0, \quad [L_y, L_x] = L_z, \quad [L_z, L_x] = -L_y \quad \text{и т. д.} \quad (50.10)$$

Скалярный же оператор при вращениях не изменяется, и, следовательно, в силу соотношения (50.5) он коммутирует с компонентами оператора момента количества движения. В частности, $(L^2)' = L^2$, поэтому

$$[L, L^2] = 0 \quad (50.11)$$

и аналогично

$$[L, r^2] = 0, \quad [L, p^2] = 0 \quad \text{и т. д.} \quad (50.12)$$

Задача 51. Коммутаторы в координатном представлении

Непосредственным вычислением в координатном представлении проверить, что для системы из N частиц имеют место перестановочные соотношения

$$[L_x, Y] = -Z, \quad [L_x, L_y] = -L_z, \quad (51.1)$$

где L — оператор момента количества движения системы в целом, а X, Y, Z — координаты ее центра масс.

Решение. Согласно определению,

$$L = \sum_j L_j, \quad X = \frac{1}{M} \sum_j m_j x_j, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (51.2)$$

где m_j — масса j -й частицы, а M — суммарная масса всей системы и, следовательно,

$$[L_x, Y] = \frac{1}{M} \sum_j \sum_k m_k [L_{jx}, y_k],$$

$$[L_x, L_y] = \sum_j \sum_k [L_{jx}, L_{ky}].$$

Фигурирующие здесь операторы L_{jx} действуют только на координаты j -й частицы и коммутируют со всеми операторами, действующими на координаты других частиц, поэтому приведенные выше двойные суммы сводятся к одинарным:

$$[L_x, Y] = \frac{1}{M} \sum_k m_k [L_{kx}, y_k], \quad (51.3)$$

$$[L_x, L_y] = \sum_k [L_{kx}, L_{ky}]. \quad (51.4)$$

Вклад каждого слагаемого можно оценить, непосредственно вычисляя соответствующие производные:

$$[L_{kx}, y_k] \psi = \left(y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) (y_k \psi) - y_k \left(y_k \frac{\partial \psi}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial \psi}{\partial y_k} \right) = -z_k \psi$$

и

$$[L_{kx}, L_{ky}] \psi = \frac{\hbar}{i} \left[\left(y_k \frac{\partial}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial}{\partial y_k} \right) \left(z_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial \psi}{\partial z_k} \right) - \left(z_k \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial z_k} \right) \left(y_k \frac{\partial \psi}{\partial z_k} - z_k \frac{\partial \psi}{\partial y_k} \right) \right] = \frac{\hbar}{i} \left(y_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial \psi}{\partial y_k} \right) = -L_{kz} \psi.$$

Подстановка полученных результатов в формулы (51.3) и (51.4) дает

$$[L_x, Y] = -\frac{1}{M} \sum_k m_k z_k = -Z \quad \text{и} \quad [L_x, L_y] = -\sum_k L_{kz} = -L_z,$$

чем и доказывается справедливость соотношений (51.1).

Задача 52. Частица со спином 1

Рассмотрев бесконечно малые вращения системы координат, показать, что векторное поле ψ пригодно для описания частицы со спином 1.

Решение. Если бесконечно малое вращение, как и в задаче 47, описывать формулой

$$\mathbf{r}' = (1 + A) \mathbf{r}, \quad (52.1)$$

то векторное поле будет преобразовываться точно так же, как радиус-вектор \mathbf{r} , поэтому

$$\psi'(\mathbf{r}') = (1 + A) \psi(\mathbf{r}). \quad (52.2)$$

Из решения же задачи 47 нам известно, что разложение в ряд Тейлора каждой компоненты $\psi'_i(\mathbf{r}')$ в окрестности \mathbf{r} должно приводить к соотношениям

$$\psi'_i(\mathbf{r}') = \left[1 - \frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{L}) \right] \psi'_i(\mathbf{r}). \quad (52.3)$$

Мы получим решение нашей задачи, проведя сравнение этих двух выражений.

С этой целью воспользуемся для матрицы A выражением (47.1б), которое запишем в виде разложения:

$$A = \varepsilon_x \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} + \varepsilon_y \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \varepsilon_z \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (52.4)^{1)}$$

или более компактно:

$$A = \frac{i}{\hbar} \sum_k \varepsilon_k S_k, \quad (52.5)$$

где

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (52.6)$$

¹⁾ Три матрицы (52.4) суть генераторы группы вращений SO(3) в трехмерном представлении.

так что равенство (52.2) теперь примет вид

$$\psi'(\mathbf{r}') = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \sum_k \varepsilon_k S_k\right) \psi(\mathbf{r}). \quad (52.7)$$

Комбинируя равенства (52.3) и (52.7), можно исключить $\psi'(\mathbf{r}')$. Это дает

$$\left(1 - \frac{i}{\hbar} \sum_k \varepsilon_k L_k\right) \psi'(\mathbf{r}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \sum_k \varepsilon_k S_k\right) \psi(\mathbf{r}),$$

или

$$\psi'(\mathbf{r}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \sum_k \varepsilon_k J_k\right) \psi(\mathbf{r}), \quad (52.8)$$

где

$$J_k = L_k + S_k. \quad (52.9)$$

Отсюда следует, что три матрицы S_k суть компоненты спина, J — полный момент количества движения, а L — его орбитальная часть. Пользуясь определениями (52.6), нетрудно показать, что операторы S_k подчиняются перестановочным соотношениям для компонент оператора момента количества движения:

$$[S_j, S_k] = -S_l \quad (j, k, l = x, y, z \text{ и их циклические перестановки}).$$

Каждая из матриц (52.6) имеет собственные значения $+1, 0, -1$, так как они отличаются от двухрядной матрицы Паули σ_y , имеющих собственные значения $+1$ и -1 , лишь одной дополнительной строкой и одним дополнительным столбцом нулей (если отвлечься от знака матрицы S_y), что приводит к собственному значению 0 в дополнение к собственным значениям матрицы σ_y . Таким образом, проекция спина на любое направление имеет собственные значения $+\hbar, 0, -\hbar$. Наконец, квадрат спина равен

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \hbar^2 \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right],$$

или $S^2 = 2\hbar^2$. В соответствии с общей формулой $S^2 = \hbar^2 s(s+1)$ получаем для спина векторного поля значение $s=1$.

Задача 53. Перестановочные соотношения компонент тензора

Рассмотрев бесконечно малые вращения системы координат, получить перестановочные соотношения компонент симметричного тензора с компонентами оператора момента количества движения.

Решение. Как было показано в задаче 50, всякий квантово-механический оператор при бесконечно малых вращениях пре-

образуется по закону

$$F' = F - \varepsilon \cdot [L, F]. \quad (53.1)$$

Если преобразование координат задается формулой $r' = Rr$, то тензор определяется трансформационными свойствами своих компонент:

$$T'_{ik} = \sum_{\mu} \sum_{\nu} R_{i\mu} R_{k\nu} T_{\mu\nu} = (RT\bar{R})_{ik}. \quad (53.2)$$

Так как при бесконечно малых вращениях $R = I + A$ и $\bar{A} = -A$, то отсюда

$$T' = (I + A)T(I - A) = T + (AT - TA); \quad (53.3)$$

сравнив с соотношением (53.1), находим

$$\varepsilon \cdot [L, T] = TA - AT. \quad (53.4)$$

Формула (53.4) является основой для решения нашей задачи.

Ниже мы ограничимся вращением вокруг оси x , когда

$$A = \varepsilon_x \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

В этом случае

$$TA = \varepsilon_x \begin{pmatrix} 0 & -T_{13} & T_{12} \\ 0 & -T_{23} & T_{22} \\ 0 & -T_{33} & T_{32} \end{pmatrix}, \quad AT = \varepsilon_x \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \\ -T_{21} & -T_{22} & -T_{23} \end{pmatrix},$$

поэтому для симметричного тензора разность

$$TA - AT = \varepsilon_x \begin{pmatrix} 0 & -T_{13} & T_{12} \\ -T_{13} & -2T_{23} & T_{22} - T_{33} \\ T_{12} & T_{22} - T_{33} & 2T_{23} \end{pmatrix} \quad (53.5)$$

также оказывается симметричной. Левая часть этого равенства, согласно (53.4), должна равняться $\varepsilon_x [L_1, T]$, следовательно,

$$\begin{aligned} [L_1, T_{11}] &= 0, & [L_1, T_{12}] &= -T_{13}, & [L_1, T_{13}] &= T_{12}, \\ [L_1, T_{22}] &= -2T_{23}, & [L_1, T_{23}] &= T_{22} - T_{33}, & [L_1, T_{33}] &= 2T_{23}. \end{aligned} \quad (53.6)$$

Перестановочные соотношения с компонентами L_2 и L_3 можно найти, рассмотрев вращения вокруг осей y и z или, что еще проще, с помощью циклических перестановок символов в формулах (53.6):

$$\begin{aligned} [L_2, T_{22}] &= 0, & [L_2, T_{23}] &= -T_{12}, & [L_2, T_{12}] &= T_{23}, \\ [L_2, T_{33}] &= -2T_{13}, & [L_2, T_{13}] &= T_{33} - T_{11}, & [L_2, T_{11}] &= 2T_{13} \end{aligned} \quad (53.7)$$

и

$$\begin{aligned} [L_3, T_{33}] &= 0, & [L_3, T_{13}] &= -T_{23}, & [L_3, T_{23}] &= T_{13}, \\ [L_3, T_{11}] &= -2T_{12}, & [L_3, T_{12}] &= T_{11} - T_{22}, & [L_3, T_{22}] &= 2T_{12}. \end{aligned} \quad (53.8)$$

Следует отметить, что все три компоненты L_k коммутируют со следом тензора:

$$[L, \text{Sp}T] = 0. \quad (53.9)$$

Последнее обстоятельство становится понятным, если записать симметричный тензор в виде

$$T = \Theta + \frac{1}{3}(\text{Sp}T) \cdot I,$$

где $\text{Sp}\Theta = 0$. Следовательно, след тензора $\text{Sp}T$ представляет собой скаляр (тензорный инвариант), но, как было показано в конце задачи 50, скаляр всегда коммутирует с компонентами L_k .

Задача 54. Тензор квадрупольного момента. Сферические гармоники

Тензор квадрупольного момента Q , определяемый соотношением

$$Q_{ik} = Q_{ki} = 3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}, \quad (54.1)$$

является симметричным тензором со следом, равным нулю, и, следовательно, он имеет пять линейно независимых компонент. Эти компоненты (с точностью до множителя r^2) можно представить в виде линейной комбинации пяти сферических гармоник второго порядка. Воспользовавшись найденными в задаче 53 перестановочными соотношениями, вычислить перестановочные соотношения сферических гармоник с компонентами оператора момента количества движения.

Решение. Сферические гармоники $Y_{2,m}$ с $m = 0, \pm 1, \pm 2$ можно выразить через декартовы координаты¹⁾:

$$\begin{aligned} r^2 Y_{2,0} &= C(3z^2 - r^2), & r^2 Y_{2,\pm 1} &= \pm C\sqrt{6}(x \pm iy)z, \\ r^2 Y_{2,\pm 2} &= C\frac{1}{2}\sqrt{6}(x \pm iy)^2, & C &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}, \end{aligned} \quad (54.2)$$

$$\oint |Y_{2,m}|^2 d\Omega = 1.$$

Эти хорошо известные формулы позволяют выразить сферические гармоники через компоненты тензора квадрупольного момента:

$$\begin{aligned} r^2 Y_{2,0} &= C Q_{33}, & r^2 Y_{2,\pm 1} &= \pm C\sqrt{\frac{2}{3}}(Q_{13} \pm iQ_{23}), \\ r^2 Y_{2,\pm 2} &= C\sqrt{\frac{2}{3}}\left[\frac{1}{2}(Q_{11} - Q_{22}) \pm iQ_{12}\right]. \end{aligned} \quad (54.3)$$

¹⁾ Выбор знака в выражениях для сферических гармоник произволен, однако различие в знаках у $Y_{2,1}$ и $Y_{2,-1}$ упрощает окончательные результаты.

Чтобы вычислить интересующие нас коммутаторы, воспользуемся теперь равенствами (53.6) — (53.8).

Так как ось z является полярной осью сферических гармоник, то мы начнем с равенств (53.8), которые с учетом того, что L_z есть соответствующая проекция момента количества движения, дают

$$\begin{aligned} r^2 [L_z, Y_{2,0}] &= C [L_z, Q_{33}] = 0, \\ r^2 [L_z, Y_{2,\pm 1}] &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ [L_z, Q_{13}] \pm i [L_z, Q_{23}] \right\} = \\ &= C \sqrt{\frac{2}{3}} (-Q_{23} \pm i Q_{13}) = \pm i r^2 Y_{2,\pm 1}, \\ r^2 [L_z, Y_{2,\pm 2}] &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \frac{1}{2} [L_z, Q_{11}] - \frac{1}{2} [L_z, Q_{22}] \pm i [L_z, Q_{12}] \right\} = \\ &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ -Q_{12} - Q_{12} \pm i (Q_{11} - Q_{22}) \right\} = \pm 2i r^2 Y_{2,\pm 2}. \end{aligned}$$

Эти три результата можно объединить в одно соотношение

$$[L_z, Y_{2,m}] = im Y_{2,m}, \quad (54.4)$$

которое становится почти очевидным, если принять во внимание, что в координатном представлении $L_z = (\hbar/i) (\partial/\partial\varphi)$ и $Y_{2,m} \sim e^{im\varphi}$. Действительно,

$$[L_z, e^{im\varphi}] = \frac{\partial}{\partial\varphi} e^{im\varphi} - e^{im\varphi} \frac{\partial}{\partial\varphi} = ime^{im\varphi}.$$

Теперь мы воспользуемся равенствами (53.6) и (53.7), чтобы вычислить перестановочные соотношения с операторами

$$L^+ = L_x + iL_y \quad \text{и} \quad L^- = L_x - iL_y.$$

Мы имеем

$$\begin{aligned} [L^+, Q_{11}] &= 2iQ_{13}, & [L^-, Q_{11}] &= -2iQ_{13}, \\ [L^+, Q_{12}] &= -Q_{13} + iQ_{23}, & [L^-, Q_{12}] &= -Q_{13} - iQ_{23}, \\ [L^+, Q_{13}] &= Q_{12} + i(Q_{33} - Q_{11}), & [L^-, Q_{13}] &= Q_{12} - i(Q_{33} - Q_{11}), \\ & & & (54.5) \\ [L^+, Q_{22}] &= -2Q_{23}, & [L^-, Q_{22}] &= -2Q_{23}, \\ [L^+, Q_{23}] &= (Q_{22} - Q_{33}) - iQ_{12}, & [L^-, Q_{23}] &= (Q_{22} - Q_{33}) + iQ_{12}, \\ [L^+, Q_{33}] &= 2(Q_{23} - iQ_{13}), & [L^-, Q_{33}] &= 2(Q_{23} + iQ_{13}). \end{aligned}$$

Непосредственное применение формул (54.3), а затем формул (54.5) и снова формул (54.3) приводит нас к перестановочным соотношениям между сферическими гармониками и оператором момента количества движения. Ниже дано несколько типичных

примеров:

$$\begin{aligned}
 1) \quad r^2 [L^+, Y_{2,1}] &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \{ [L^+, Q_{13}] + i [L^+, Q_{23}] \} = \\
 &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \{ Q_{12} + i(Q_{33} - Q_{11}) + i(Q_{22} - Q_{33}) + Q_{12} \} = \\
 &= -2iC \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \frac{1}{2} (Q_{11} - Q_{22}) + iQ_{12} \right\} = -2ir^2 Y_{2,2}.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2) \quad r^2 [L^-, Y_{2,1}] &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \{ [L^-, Q_{13}] + i [L^-, Q_{23}] \} = \\
 &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \{ Q_{12} - i(Q_{33} - Q_{11}) + i(Q_{22} - Q_{33}) - Q_{12} \} = \\
 &= C \sqrt{\frac{2}{3}} i (Q_{11} + Q_{22} - 2Q_{33}).
 \end{aligned}$$

Так как

$$\text{Sp } Q = Q_{11} + Q_{22} + Q_{33} = 0,$$

то выражение в круглых скобках равно $-3Q_{33}$, поэтому

$$r^2 [L^-, Y_{2,1}] = -i\sqrt{6}r^2 Y_{2,0}$$

И наконец, коммутаторы, содержащие сферические гармоники с максимальным значением m , обращаются в нуль:

$$\begin{aligned}
 3) \quad r^2 [L^+, Y_{2,2}] &= C \sqrt{\frac{2}{3}} \left\{ \frac{1}{2} [L^+, Q_{11}] - \frac{1}{2} [L^+, Q_{22}] + \right. \\
 &\quad \left. + i [L^+, Q_{12}] \right\} = C \sqrt{\frac{2}{3}} (iQ_{13} + Q_{23} - iQ_{13} - Q_{23}) = 0.
 \end{aligned}$$

Полученные результаты можно объединить в две простые формулы:

$$[L^+, Y_{2,m}] = -i\sqrt{6-m(m+1)} Y_{2,m+1} \quad (54.6)$$

и

$$[L^-, Y_{2,m}] = -i\sqrt{6-(m-1)m} Y_{2,m-1} \quad (54.7)$$

Равенства (54.4), (54.6) и (54.7) дают нам полный набор искоемых коммутаторов.

Задача 55. Преобразование сферических гармоник

Пусть *конечный* поворот системы координат характеризуется тремя углами Эйлера α , β , γ . Выяснить трансформационные свойства волновых функций, являющихся сферическими гармониками.

Решение. Начнем с общепринятого определения углов Эйлера. Исходная система координат x , y , z сначала поворачивается на угол α вокруг оси z , причем $0 \leq \alpha \leq 2\pi$. В результате получается система координат x_1 , y_1 , z_1 , которую теперь следует повернуть на угол β ($0 \leq \beta \leq \pi$) вокруг оси y_1 . Получающуюся таким образом промежуточную систему координат x_2 , y_2 , z_2

в заключение поворачивают на угол γ ($0 \leq \gamma \leq 2\pi$) вокруг оси z_2 , и она переходит в систему координат x', y', z' .

Путем последовательного применения формул (48.1) нетрудно убедиться, что всякая волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ при повороте вокруг оси A на конечный угол ε_A преобразуется по закону

$$\psi(\mathbf{r}') = D(\varepsilon_A) \psi(\mathbf{r}), \quad \text{где } D(\varepsilon_A) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_A L_A}. \quad (55.1)$$

Таким образом, закон преобразования волновой функции при трех следующих друг за другом эйлеровых поворотах имеет вид

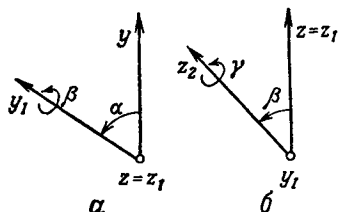
$$\psi(\mathbf{r}') = D(\alpha, \beta, \gamma) \psi(\mathbf{r}), \quad (55.2)$$

где

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma L_{z_2}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z}. \quad (55.3)$$

Теперь мы попытаемся выразить три поворота вокруг осей z, y_1, z_2 , фигурирующие в формуле (55.3), через повороты вокруг осей исходной системы координат.

Чтобы произвести поворот на угол β вокруг оси y_1 , обратимся к фиг. 32, *а*, на которой оси z и z_1 совпадают между собой и перпендикулярны плоскости чертежа, а оси y и y_1 образуют угол α . Мы заменим поворот на угол β вокруг оси y_1 сначала обратным поворотом системы координат x_1, y_1, z_1 на угол $-\alpha$ вокруг оси z , затем произведем поворот на угол β вокруг оси y вместо оси y_1 и наконец повернем систему координат снова вокруг оси z на угол $+\alpha$. Таким образом, имеем



Фиг. 32. Повороты осей координатных систем.

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_y} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \alpha L_z}. \quad (55.4)$$

Аналогичным образом мы разложим поворот на угол γ вокруг оси z_2 (фиг. 32, *б*). Для этого сначала повернем ось z_2 назад на угол $-\beta$ вокруг оси y_1 , затем повернем ось y_1 на угол γ вокруг оси z и наконец восстановим исходное положение оси z_2 с помощью поворота на угол β вокруг оси y_1 :

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma L_{z_2}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma L_z} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}}. \quad (55.5)$$

Комбинируя равенства (55.3)—(55.5), в результате находим

$$\begin{aligned} D(\alpha, \beta, \gamma) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma L_z} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_{y_1}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} = \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_y} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} (\gamma + \alpha) L_z}, \end{aligned}$$

или

$$D(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_y} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma L_z}. \quad (55.6)$$

Формула (55.6) является весьма общей и по существу чисто геометрической формулой; ниже мы ее применим в частном случае сферических гармоник. Функция $Y_{L,M}$ является собственной функцией оператора L_z , принадлежащей собственному значению $\hbar M$. Оператор L_y , как нетрудно усмотреть из результатов задачи 56, может изменять только индекс M , но не индекс L , поэтому в новой системе координат ϑ' , φ' мы в соответствии с формулой (55.2) будем иметь

$$\begin{aligned} Y_{L,M}(\vartheta', \varphi') &= D(\alpha, \beta, \gamma) Y_{L,M}(\vartheta, \varphi) = \\ &= \sum_{M'=-L}^L D_{M',M}^L Y_{L,M'}(\vartheta, \varphi). \end{aligned} \quad (55.7)$$

Перейдем к вычислению коэффициентов разложения:

$$\begin{aligned} D_{M',M}^L &= \oint Y_{L,M'}^*(\vartheta, \varphi) Y_{L,M}(\vartheta', \varphi') d\Omega \Rightarrow \\ &= \oint Y_{L,M'}^*(\vartheta, \varphi) D(\alpha, \beta, \gamma) Y_{L,M}(\vartheta, \varphi) d\Omega, \end{aligned}$$

или короче

$$D_{M',M}^L = \langle LM' | D(\alpha, \beta, \gamma) | LM \rangle, \quad (55.8)$$

где $D(\alpha, \beta, \gamma)$ — оператор, определенный формулой (55.6). Далее мы можем написать ¹⁾

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} \gamma L_z} | LM \rangle &= e^{-i\gamma M} | LM \rangle, \\ \langle LM' | e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} &= e^{-i\alpha M'} \langle LM' | \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$D_{M',M}^L = e^{-i(\alpha M' + \gamma M)} d_{M',M}^L(\beta), \quad (55.9)$$

где

$$d_{M',M}^L(\beta) = \langle LM' | e^{-\frac{i}{\hbar} \beta L_y} | LM \rangle$$

— довольно сложная функция переменной β . Таким образом, закон преобразования сферических гармоник имеет вид

$$Y_{L,M}(\vartheta', \varphi') = \sum_{M'=-L}^L e^{-i(\alpha M' + \gamma M)} d_{M',M}^L(\beta) Y_{L,M'}(\vartheta, \varphi). \quad (55.10)$$

¹⁾ Знак в формуле с бра-вектором может показаться сомнительным. Тем не менее мы имеем

$$\langle LM' | e^{-\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} = \langle \frac{i}{\hbar} \alpha L_z Y_{L,M'} | = \langle e^{i\alpha M'} Y_{L,M'} | = e^{-i\alpha M'} \langle LM' |,$$

поскольку $Y_{L,M'}^* \sim e^{-iM'\varphi}$ и, кроме того, $L_z Y_{L,M'}^* = -\hbar M' Y_{L,M'}^*$.

Задача 56. Построение собственных векторов оператора L_z в абстрактном гильбертовом пространстве

Пусть атомная система находится в состоянии, которое характеризуется определенным орбитальным квантовым числом l . Требуется построить собственные векторы оператора L_z , воспользовавшись для этого методом задачи 31.

Решение. Мы выберем такую гильбертову систему координат, в которой оператор L^2 диагонален, т. е. для всех рассматриваемых векторов (в единицах \hbar)

$$L^2 = \frac{1}{2}(L^+L^- + L^-L^+) + L_z^2 = l(l+1). \quad (56.1)$$

Пусть далее $|\psi_m\rangle$ — собственный вектор оператора L_z , принадлежащий (еще не определенному) собственному значению m . Подействуем на этот вектор оператором

$$L^+ = L_x + iL_y, \quad (56.2)$$

который удовлетворяет (см. задачу 51) перестановочному соотношению

$$L^+L_z - L_zL^+ = -L^+. \quad (56.3)$$

Тогда, учитывая равенство

$$L_z|\psi_m\rangle = m|\psi_m\rangle, \quad (56.4)$$

получаем

$$L^+L_z|\psi_m\rangle = (L_z - 1)|L^+\psi_m\rangle = m|L^+\psi_m\rangle,$$

или

$$L_z|L^+\psi_m\rangle = (m+1)|L^+\psi_m\rangle. \quad (56.5)$$

Отсюда следует, что вектор $|L^+\psi_m\rangle$ является собственным вектором оператора L_z , принадлежащим собственному значению $m+1$. Этот вектор пока еще не нормирован, так как скалярное произведение

$$\langle L^+\psi_m | L^+\psi_m \rangle = \langle L^-L^+\psi_m | \psi_m \rangle, \quad \text{где } L^- = (L^+)^{\dagger},$$

не равно единице. Из равенства (56.1) и перестановочного соотношения

$$L^+L^- - L^-L^+ = 2L_z \quad (56.6)$$

находим

$$L^-L^+ = L^2 - L_z^2 - L_z, \quad (56.7)$$

поэтому

$$\langle L^-L^+\psi_m | \psi_m \rangle = [l(l+1) - m(m+1)] \langle \psi_m | \psi_m \rangle.$$

Таким образом, нормированный собственный вектор, принадлежащий собственному значению $m+1$, имеет вид

$$|\psi_{m+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}} |L^+\psi_m\rangle. \quad (56.8)$$

Эту процедуру можно повторять вплоть до значения $m = l$. Следующий шаг по необходимости приводит к соотношению $L^+|\psi_l\rangle = 0$, в результате чего последовательность собственных векторов обрывается, а вектора $|\psi_{l+1}\rangle$ просто не существует.

Кроме возрастающей последовательности, можно построить убывающую последовательность путем повторного применения эрмитово сопряженного оператора

$$L^- = L_x - iL_y, \quad (56.9)$$

который удовлетворяет перестановочному соотношению

$$L^-L_z - L_zL^- = L^-. \quad (56.10)$$

Действуя оператором L^- на обе части равенства (56.4), получаем

$$L_z|L^-\psi_m\rangle = (m-1)|L^-\psi_m\rangle. \quad (56.11)$$

Собственный вектор здесь снова не нормирован, так как

$$\begin{aligned} \langle L^-\psi_m | L^-\psi_m \rangle &= \langle L^+L^-\psi_m | \psi_m \rangle = \langle (L^2 - L_z^2 + L_z) \psi_m | \psi_m \rangle = \\ &= [l(l+1) - m(m-1)] \langle \psi_m | \psi_m \rangle. \end{aligned}$$

Отсюда следует

$$|\psi_{m-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} |L^-\psi_m\rangle. \quad (56.12)$$

С помощью этой формулы можно получать собственные векторы, принадлежащие даже отрицательным собственным значениям m вплоть до значений $m = -l$. Следующий шаг должен был бы привести к соотношению

$$L^-|\psi_{-l}\rangle = 0,$$

так что вектора $|\psi_{-l-1}\rangle$ не существует.

Замечание 1. Из теории Шредингера нам известно, что сферические функции

$$|\psi_m\rangle = Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (56.13)$$

с точностью до произвольных фазовых множителей представляют собой реализацию рассмотренных выше нормированных гильбертовых векторов. Следовательно, формулы (56.8) и (56.12), опять-таки с точностью до фазового множителя, который обычно выбирают равным $(-1)^m$, идентичны рекуррентным соотношениям для сферических функций:

$$\begin{aligned} L^+Y_{l,m} &= -\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}Y_{l,m+1}, \\ L^-Y_{l,m} &= -\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}Y_{l,m-1}. \end{aligned} \quad (56.14)$$

Замечание 2. В приведенном решении молчаливо предполагалось, что l — целое число. Так как при каждом действии операторов L^+ и L^- число m изменяется на ± 1 , а максимальное и минимальное значения m соответственно равны $+l$ и $-l$, то разность этих граничных значений, равная $2l$, должна быть целым числом. Но это возможно как при целых значениях l и m , так и при *полуцелых*. Таким образом, перестановочные соотношения для компонент момента количества движения в принципе допускают квантование с помощью полуцелых чисел. Такое квантование не возникает при рассмотрении момента

количества движения материальной точки, но это отнюдь не ограничивает возможностей теории. Указанные полудельные значения появляются в том случае, когда наряду с «орбитальным» моментом в рассмотрение включается спиновый момент частицы.

Задача 57. Ортогональность сферических гармоник

Показать, что выведенные в предыдущей задаче собственные векторы оператора L_z при фиксированном значении числа l образуют ортогональную систему, и определить по отношению к ней матричные элементы операторов L^+ и L^- .

Решение. Как было показано, векторы $|\psi_m\rangle$ удовлетворяют соотношениям

$$L^-L^+|\psi_m\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]|\psi_m\rangle, \quad (57.1a)$$

$$L^+L^-|\psi_m\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]|\psi_m\rangle. \quad (57.1b)$$

Образуем два равных скалярных произведения:

$$\langle L^+\psi_{m'} | L^+\psi_m \rangle = \langle \psi_{m'} | L^-L^+\psi_m \rangle \quad (57.2a)$$

и

$$\langle L^+\psi_{m'} | L^+\psi_m \rangle = \langle L^-L^+\psi_{m'} | \psi_m \rangle. \quad (57.2b)$$

Применяя к правым частям этих равенств соотношение (57.1a), соответственно получаем выражения

$$[l(l+1) - m(m+1)]\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle$$

и

$$[l(l+1) - m'(m'+1)]\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle.$$

Разность этих выражений равна нулю:

$$[m(m+1) - m'(m'+1)]\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle = 0. \quad (57.3)$$

Второй сомножитель в левой части должен равняться нулю за исключением тех случаев, когда равен нулю первый сомножитель. Таким образом, искомая ортогональность доказана для всех случаев, кроме $m' = m$ либо $m' = -m - 1$. Чтобы исключить последнюю возможность, воспользуемся соотношением (57.1b). В полной аналогии с предыдущими выкладками имеем

$$\begin{aligned} \langle L^-\psi_{m'} | L^-\psi_m \rangle &= \langle \psi_{m'} | L^+L^-\psi_m \rangle = \\ &= [l(l+1) - m(m-1)]\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle = \\ &= \langle L^+L^-\psi_{m'} | \psi_m \rangle = [l(l+1) - m'(m'-1)]\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle. \end{aligned}$$

Снова рассматривая разность

$$[m(m-1) - m'(m'-1)]\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle, \quad (57.4)$$

видим, что на этот раз первый сомножитель обращается в нуль при $m' = m$ и $m' = -m + 1$, но не при $m' = -m - 1$. Следовательно, оба соотношения (57.3) и (57.4), рассматриваемые сов-

местно, приводят к искомому условию ортогональности:

$$\langle \psi_{m'} | \psi_m \rangle = \delta_{m'm} \quad (57.5)$$

(выше мы воспользовались нормировкой, введенной в предыдущей задаче).

С помощью соотношений (56.8) и (56.12) теперь нетрудно получить матричные элементы операторов L^+ и L^- . Придерживаясь соглашения о знаке (56.14), имеем

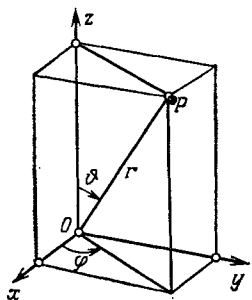
$$\begin{aligned} \langle \psi_{m+1} | L^+ | \psi_m \rangle &= -\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}, \\ \langle \psi_{m-1} | L^- | \psi_m \rangle &= -\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}, \end{aligned} \quad (57.6)$$

все прочие матричные элементы исчезают в силу соотношения (57.5).

Г. Сферически симметричные потенциалы

а. Связанные состояния

Чтобы решить уравнение Шредингера в случае сферически симметричного потенциала, зависящего только от r (центральные силы), целесообразно с помощью формул



$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, \\ y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \vartheta \end{aligned} \quad (a.1)$$

ввести сферические координаты (фиг. 33). Ось z называется полярной осью, ϑ — угол между полярной осью и радиус-вектором \mathbf{r} ($0 \leq \vartheta \leq \pi$), а угол φ характеризует поворот вокруг полярной оси ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$). В этих координатах оператор Лапласа имеет вид

Фиг. 33. Сферические координаты.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \mathcal{A}, \quad (a.2)$$

где \mathcal{A} — оператор, зависящий только от углов:

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (a.3)$$

В рассматриваемом случае уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \mathcal{A} \right) \psi + V(r) \psi = E \psi \quad (a.4)$$

допускает разделение переменных

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (a.5)$$

Функция $\chi_l(r)$ удовлетворяет радиальному волновому уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2 \chi_l}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_l \right) + V(r) \chi_l = E \chi_l, \quad (\text{a.6})$$

а функции $Y_{l,m}$ удовлетворяют дифференциальному уравнению для сферических гармоник

$$\mathcal{A}Y_{l,m} + l(l+1)Y_{l,m} = 0. \quad (\text{a.7})$$

Величина $l(l+1)$ играет здесь роль постоянной разделения переменных r и ϑ , φ . Несингулярные решения существуют лишь в том случае, если l — целое число: $l = 0, 1, 2, \dots$. Для каждого целого l существует $2l+1$ несингулярных однозначных решений, отвечающих различным значениям m ($m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$).

В нижеследующих задачах мы всегда будем пользоваться нормировкой сферических гармоник в соответствии с условием

$$\oint |Y_{l,m}|^2 d\Omega = 1. \quad (\text{a.8})$$

Частное решение при $m=0$ будем записывать в виде

$$Y_{l,0}(\vartheta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \vartheta). \quad (\text{a.9})$$

Оно зависит только от угла ϑ и называется *зональной* сферической гармоникой. Функция P_l нормирована таким образом, что $P_l(1) = 1$, и представляет собой полином степени l относительно $\cos \vartheta$; ее называют полиномом Лежандра.

В сферических координатах компоненты оператора момента количества движения частицы имеют вид

$$\begin{aligned} L^+ &= L_x + iL_y = -\frac{\hbar}{i} e^{i\varphi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L^- &= L_x - iL_y = -\frac{\hbar}{i} e^{-i\varphi} \left(i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned} \quad (\text{a.10})$$

Оператор квадрата момента количества движения

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \frac{1}{2} (L^+ L^- + L^- L^+) + L_z^2 \quad (\text{a.11})$$

выражается в сферических координатах следующим образом:

$$L^2 = - \left[\hbar^2 \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (\text{a.12})$$

Если воспользоваться сокращенным обозначением (а.3), последнюю формулу можно записать короче:

$$L^2 = -\hbar^2 \mathcal{A}. \quad (\text{a.13})$$

Как следует из уравнения (а.7), функции $Y_{l,m}$ являются собственными функциями оператора квадрата момента количества движения L^2 , принадлежащими собственным значениям $\hbar^2 l(l+1)$. Так как зависимость функций $Y_{l,m}$ от угла φ имеет вид $e^{im\varphi}$, то из равенства (а.10) следует, что $Y_{l,m}$ есть собственная функция оператора L_z , принадлежащая собственному значению $\hbar m$, где $|m| \leq l$. Эти два свойства волновых функций частицы в поле с центральной симметрией являются применительно к квантовой механике своеобразным отражением классического закона сохранения момента количества движения.

Равенства (а.2) и (а.10), разумеется, можно получить с помощью преобразования координат (а.1). Однако этот прямой путь оказывается довольно громоздким. Более изящный метод, использующий связь между оператором момента количества движения и бесконечно малыми поворотами системы координат, был изложен в задачах 47—49.

Математические детали, касающиеся сферических гармоник, приведены в приложении, том 2, стр. 296.

Задача 58. Средние значения компонент момента количества движения

Что можно сказать о компонентах момента количества движения L_x , L_y , L_z в следующих двух случаях?

а) Волновая функция частицы, движущейся в центральном поле, зависит от углов как $Y_{l,m}$.

б) При данном значении l функции $Y_{l,m}$ и $Y_{l,-m}$ зависят от угла φ одинаковым образом. Оба решения вырождены, поэтому их линейные комбинации, пропорциональные $\cos m\varphi$ и $\sin m\varphi$, по-прежнему являются решениями уравнения Шредингера в случае центральных сил.

Решение

а. Сферическая гармоника $Y_{l,m}$ есть собственная функция операторов L^2 и L_z , принадлежащая соответственно собственным значениям $\hbar^2 l(l+1)$ и $\hbar m$. Следовательно, компонента L_z имеет вполне определенное значение в рассматриваемом состоянии. Две другие компоненты L_x и L_y по необходимости не имеют определенных значений, так как компоненты момента количества движения описываются некоммутирующими операторами (см. задачи 50 и 51). Эту ситуацию можно пояснить с помощью следующей *классической картины*. Для каждого отдельного движения все три компоненты L имеют фиксированные значения:

$$L_x = L \sin \vartheta \cos \varphi,$$

$$L_y = L \sin \vartheta \sin \varphi,$$

$$L_z = L \cos \vartheta.$$

В нашем распоряжении, однако, имеется лишь неполная информация, позволяющая точно определить L_z , но не содержащая

никаких сведений относительно «фазового» угла φ . Тогда в каждом отдельном случае мы можем определить лишь фазовое среднее, например,

$$\bar{L}_x = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} L_x d\varphi.$$

Так как величина L_z не зависит от угла φ , то она имеет вполне определенное значение; что же касается средних значений L_x и L_y , то они обращаются в нуль. Различие между классической и квантовой механикой состоит в том, что в первом случае в принципе можно было бы получить полную информацию и тем самым сделать фазовое усреднение ненужным, во втором же случае получить полную информацию из-за некоммутативности операторов вообще невозможно, так что приходится довольствоваться средними значениями.

Вместо классического среднего по фазе квантовая механика позволяет нам вычислить математическое ожидание, т. е. среднее по состоянию:

$$\langle L_x \rangle = \oint Y_{l,m}^* L_x Y_{l,m} d\Omega \quad \text{и т. д.}$$

Математическое ожидание описывает средний результат, полученный на основании большого числа независимых измерений, произведенных над системами, которые находились в одном и том же состоянии. Если все эти измерения приводят к одному и тому же результату (именно такова ситуация в нашем случае с компонентой L_z), то мы имеем дело с вполне определенным значением, и математическое ожидание переходит в собственное значение. Если же различные измерения приводят к разным результатам, то на основании квантовой теории мы можем получить только соответствующее среднее значение¹⁾.

Вместо того чтобы вычислять средние значения компонент момента, целесообразнее иметь дело с их комбинациями L^+ и L^- . Действие операторов (а.10) на функцию $Y_{l,m}$ дает [см. приложение, а также соотношения (56.14)]

$$\begin{aligned} L^+ Y_{l,m} &= -\hbar \sqrt{(l+m+1)(l-m)} Y_{l,m+1}, \\ L^- Y_{l,m} &= -\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l,m-1}. \end{aligned} \quad (58.1)$$

Следовательно, в выражениях $\langle L^+ \rangle$ и $\langle L^- \rangle$ появляются лишь интегралы вида

$$\oint Y_{l,m}^* Y_{l,m \pm 1} d\Omega,$$

¹⁾ Квантовая теория дает возможность не только предсказать средний результат большого числа независимых измерений, но и указать вероятность появления каждого отдельного результата.— *Прим. ред.*

обращающиеся в нуль в силу ортогональности сферических гармоник. Таким образом, математические ожидания L_x и L_y так же, как и фазовые средние в классической картине, равны нулю.

б. Две действительные волновые функции, рассматриваемые в этом случае, имеют вид

$$\begin{aligned} u_+ &= \frac{1}{2} (Y_{l, m} + Y_{l, -m}) \sim \cos m\varphi, \\ u_- &= \frac{1}{2i} (Y_{l, m} - Y_{l, -m}) \sim \sin m\varphi. \end{aligned} \quad (58.2)$$

Обе функции являются собственными функциями оператора L^2 , но не являются собственными функциями ни одного из операторов L_x , L_y , L_z ¹⁾, так как

$$\begin{aligned} L^{\pm} u_{\pm} &= -\frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(l \pm m + 1)(l \mp m)} Y_{l, m \pm 1} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(l \mp m + 1)(l \pm m)} Y_{l, -m \pm 1} \right], \end{aligned} \quad (58.3)$$

$$\begin{aligned} L^{\pm} u_{\mp} &= i \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(l \pm m + 1)(l \mp m)} Y_{l, m \pm 1} - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{(l \mp m + 1)(l \pm m)} Y_{l, -m \pm 1} \right], \\ L_z u_{\pm} &= \hbar m i u_{\mp}, \quad L_z u_{\mp} = -\hbar m i u_{\pm}. \end{aligned} \quad (58.4)$$

Следовательно, во всех трех случаях нас должны интересовать лишь средние значения. Для L_x и L_y (или L^+ и L^-) мы по существу должны повторить выкладки, которые были сделаны в случае „а“; для математических ожиданий, как и ранее, в силу ортогональности сферических гармоник получаются нулевые значения. Что касается L_z , то равенства (58.4) и здесь приводят к нулевым средним значениям, поскольку

$$\langle L_z \rangle = \oint u_{\pm}^* L_z u_{\pm} d\Omega = \pm \hbar m i \oint u_{\pm} u_{\mp} d\Omega = 0,$$

а функции u_+ и u_- также ортогональны. Это нетрудно усмотреть, заметив, что

$$\oint u_+ u_- d\Omega \sim \int_0^{2\pi} \cos m\varphi \sin m\varphi d\varphi = 0.$$

Между математическими ожиданиями $\langle L_x \rangle$ и $\langle L_y \rangle$, с одной стороны, и математическим ожиданием $\langle L_z \rangle$ — с другой, однако, имеется существенное различие. В классической картине волновым функциям u_+ и u_- все еще соответствуют состояния, для которых фазовый угол φ так же, как и в случае „а“, может принимать все возможные значения. Угол же ϑ может принимать всего два различных значения: $\vartheta_1 = \vartheta$ и $\vartheta_2 = \pi - \vartheta$, поэтому

¹⁾ Исключение представляет случай $m=0$. — Прим ред.

$$L_z = \pm L \cos \vartheta \quad \text{и} \quad \bar{L}_z = L \cos \vartheta - L \cos \vartheta = 0.$$

В квантовой механике математическое ожидание L_z проистекает из смеси взятых с равными весами состояний с $L_z = +\hbar m$ и $L_z = -\hbar m$. В этом можно убедиться с помощью равенств (58.3) и (58.4): при действии операторов L_x и L_y вместо функций u_+ и u_- получаются совершенно иные функции, в то время как при действии оператора L_z функции u_+ и u_- просто меняются местами, поэтому из их линейной комбинации мы снова можем обозвать собственные функции оператора L_z . Действительно,

$$L_z u_1 = \hbar m u_1 \quad \text{для} \quad u_1 = u_+ + i u_-$$

и

$$L_z u_2 = -\hbar m u_2 \quad \text{для} \quad u_2 = u_+ - i u_-.$$

Замечание. Действительные комбинации типа (58.2) играют роль в квантовой химии, где предпочтительнее рассматривать не момент количества движения, а избранные направления, определяемые местоположением соседних атомов в молекуле.

Задача 59. Радиальная компонента оператора импульса

Получить оператор, канонически сопряженный координате r . Каков явный вид этого оператора в координатном представлении?

Решение. В классической механике импульс p_r , сопряженный радиусу r , определяется как проекция вектора \mathbf{p} на направление радиус-вектора \mathbf{r} :

$$p_r = \frac{1}{r} (\mathbf{p}\mathbf{r}). \quad (59.1)$$

В квантовой механике это определение из-за некоммутативности компонент \mathbf{p} и \mathbf{r} становится двусмысленным: классическому выражению (59.1) априори могла бы соответствовать любая линейная комбинация вида

$$p_r = \lambda \mathbf{p} \frac{\mathbf{r}}{r} + (1-\lambda) \frac{\mathbf{r}}{r} \mathbf{p}. \quad (59.2)$$

Оператор p_r должен быть эрмитов, т. е. $p_r = p_r^\dagger$. Это дает $\lambda = 1 - \lambda$ или $\lambda = 1/2$ и, следовательно,

$$p_r = \frac{1}{2} \left(\mathbf{p} \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{\mathbf{r}}{r} \mathbf{p} \right). \quad (59.3)$$

Чтобы показать, что это симметричное выражение действительно является оператором, канонически сопряженным с радиусом r , мы должны проверить справедливость перестановочного соотношения

$$p_r r - r p_r = \frac{\hbar}{i} \quad (59.4)$$

при условии, что оно выполняется для прямоугольных декартовых компонент. Для доказательства справедливости соотношения (59.4) воспользуемся равенством

$$\mathbf{pr} - r\mathbf{p} = 3 \frac{\hbar}{i},$$

которое сразу же следует из формулы скалярного произведения в прямоугольной декартовой системе координат. Мы имеем

$$\begin{aligned} p_r r - r p_r &= \frac{1}{2} \left[(\mathbf{pr}) + \frac{1}{r} (r\mathbf{p}) r - r (\mathbf{pr}) \frac{1}{r} - (r\mathbf{p}) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[3 \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} (\mathbf{pr} - 3 \frac{\hbar}{i}) r - r (\mathbf{pr}) \frac{1}{r} \right] = \\ &= \frac{1}{2r} \left[(\mathbf{pr}) - r^2 (\mathbf{pr}) \frac{1}{r^2} \right] r. \end{aligned}$$

Здесь

$$r^2 (\mathbf{pr}) = (x^2 + y^2 + z^2) (p_x x + p_y y + p_z z),$$

и так как

$$x^2 p_x = -2 \frac{\hbar}{i} x + p_x x^2 \text{ и т. д.,}$$

то

$$r^2 (\mathbf{pr}) = -2 \frac{\hbar}{i} r^2 + (\mathbf{pr}) r^2,$$

и мы получаем

$$p_r r - r p_r = \frac{1}{2r} \left\{ (\mathbf{pr}) + \left[2 \frac{\hbar}{i} r^2 - (\mathbf{pr}) r^2 \right] \frac{1}{r^2} \right\} r = \frac{\hbar}{i}.$$

Тем самым справедливость соотношения (59.4) установлена.

Чтобы найти явный вид оператора p_r в координатном представлении, запишем равенство (59.3) в декартовых координатах

$$p_r = \frac{1}{2} \left(p_x \frac{x}{r} + p_y \frac{y}{r} + p_z \frac{z}{r} + \frac{x}{r} p_x + \frac{y}{r} p_y + \frac{z}{r} p_z \right)$$

и учтем, что

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \text{ и т. д.}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \left(p_x \frac{x}{r} + \frac{x}{r} p_x \right) \psi &= \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{r} \psi \right) + \frac{x}{r} \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] = \\ &= \frac{\hbar}{i} \left[2 \frac{x}{r} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3} \right) \psi \right]. \end{aligned}$$

Добавляя сюда аналогичные результаты, относящиеся к y и z , и замечая, что

$$x \frac{\partial \psi}{\partial x} + y \frac{\partial \psi}{\partial y} + z \frac{\partial \psi}{\partial z} = (\mathbf{r} \nabla) \psi = r \frac{\partial \psi}{\partial r},$$

окончательно получаем (см. также задачу 49)

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right). \quad (59.5)$$

Эрмитовость этого оператора легко показать, непосредственно проверив справедливость соотношения

$$\langle u | p_r v \rangle = \langle p_r u | v \rangle$$

для любой пары комплексных функций u и v , для которых эти интегралы имеют смысл. Мы находим

$$\begin{aligned} \langle u | p_r v \rangle &= \int u^* \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial v}{\partial r} + \frac{1}{r} v \right) d\tau, \\ \langle p_r u | v \rangle &= \int \left[\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r} u \right) \right]^* v d\tau = \int \left[-\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial u^*}{\partial r} + \frac{1}{r} u^* \right) \right] v d\tau. \end{aligned}$$

Эти два интеграла будут равны в том случае, если

$$\frac{\hbar}{i} \int \left(u^* \frac{\partial v}{\partial r} + u^* \frac{1}{r} v + \frac{\partial u^*}{\partial r} v + u^* \frac{1}{r} v \right) d\tau = 0,$$

или

$$\oint d\Omega \int_0^\infty r^2 \left[\frac{\partial}{\partial r} (u^* v) + \frac{2}{r} u^* v \right] dr = 0.$$

Внутренний интеграл можно преобразовать к виду

$$\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r} (u^* v r^2) dr = [u^* v r^2]_0^\infty,$$

так что он действительно обращается в нуль, если функции u^* и v конечны в точке $r=0$ и исчезают на бесконечности. Следует, однако, заметить, что нормировочные интегралы $\langle u | u \rangle$ и $\langle v | v \rangle$ существуют и в том случае, когда функции u и v имеют в начале координат особенность вида $1/r$. Таким образом, одного условия нормировки не всегда бывает достаточно для исключения не имеющих физического смысла решений, например в случае сферически симметричной ямы при $l=0$.

Задача 60. Решения, близкие к собственным функциям

Дана потенциальная яма радиусом a с характеристическим безразмерным параметром

$$W^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2 = 9,$$

где V_0 — глубина ямы. Построить графики волновых функций для $l=0$ и $ka=2,20; 2,28; 2,36$ (k — волновое число внутри ямы). Эти значения произведения ka выбраны таким образом, что они лежат довольно близко к наименьшему собственному значению.

Решение. Обозначим посредством

$$(\kappa a)^2 = W^2 - (ka)^2 \quad (60.1)$$

энергетический параметр вне ямы, тогда волновая функция внутри и вне ямы будет соответственно иметь вид

$$u_i = \frac{1}{ka} \sin(ka x) \quad (60.2a)$$

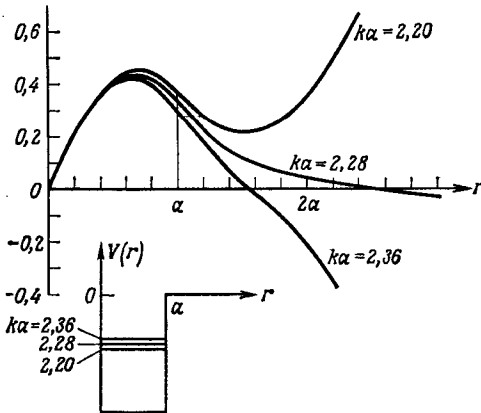
и

$$u_e = \frac{\cos ka}{ka} \operatorname{sh}[\kappa a(x-1)] + \frac{\sin ka}{ka} \operatorname{ch}[\kappa a(x-1)], \quad (60.2б)$$

где

$$x = \frac{r}{a}, \quad (60.3)$$

— безразмерная радиальная координата с радиусом ямы в качестве единицы длины. Нормировка волновой функции выбрана



Фиг 34. Волновые функции для энергетических уровней, близких к собственному значению гамильтониана.

таким образом, чтобы выполнялись начальные условия $u=0$ и $du/dx=1$ при $x=0$, а коэффициенты функции $u_e(x)$ определены из условия непрерывности u и u' на границе ямы в точке $x=1$.

Для получения собственных значений необходимо потребовать, чтобы коэффициенты при гиперболических функциях в формуле (60.2б) удовлетворяли соотношению

$$\frac{\cos ka}{ka} = -\frac{\sin ka}{ka},$$

которое с учетом равенства (60.1) можно записать в виде

$$\frac{\operatorname{tg} ka}{ka} = -\frac{1}{\sqrt{W^2 - (ka)^2}} \quad (60.4)$$

(ср. задачу 25). Для случая $W^2=9$ решение равно

$$ka = 2,2789. \quad (60.5)$$

Волновые функции (60.2a) и (60.2б) изображены на фиг. 34, здесь же схематически показаны потенциальная яма и соответ-

ствующие энергетические уровни. Если выбранное значение энергии ($ka = 2,20$) меньше собственного значения, то длина волны внутри ямы оказывается слишком большой, и уменьшение амплитуды волновой функции на границе ямы недостаточно для того, чтобы заставить ее асимптотически стремиться к нулю — на больших расстояниях волновая функция вновь возрастает. С другой стороны, если выбранное значение энергии ($ka = 2,36$) слишком велико, а следовательно, длина волны внутри ямы слишком мала, то уменьшение амплитуды волновой функции на границе ямы оказывается чрезмерным и она обращается в нуль уже на конечном расстоянии, но в дальнейшем, будучи отрицательной, вновь возрастает по абсолютной величине. Промежуточное значение энергии ($ka = 2,28$) настолько близко расположено к собственному значению (60.5), что волновая функция вне ямы почти точно стремится к нулю. Так как тем не менее эта энергия все-таки немного больше энергии основного уровня, то амплитуда волновой функции на большом расстоянии от ямы становится отрицательной и растет по абсолютной величине — это возрастание отсутствует лишь для того значения произведения ka , которое определяется формулой (60.5).

Задача 61. Квадрупольный момент

Для частицы в сферически симметричном поле вычислить квадрупольный момент в случае состояния с определенными значениями квадрата момента и его проекции на ось z .

Решение. Волновая функция, описывающая интересующее нас состояние, имеет вид

$$u = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad (61.1)$$

а тензор квадрупольного момента, согласно определению задачи 54, равен

$$Q_{ik} = 3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}. \quad (61.2)$$

Мы должны вычислить квантовомеханические средние

$$\langle Q_{ik} \rangle = \int_0^\infty dr |\chi_l(r)|^2 \oint Q_{ik} |Y_{l,m}|^2 d\Omega. \quad (61.3)$$

Недиагональные компоненты тензора Q_{ik} зависят от угла φ соответственно как $\cos \varphi \sin \varphi$, $\cos \varphi$ и $\sin \varphi$, в то время как $|Y_{l,m}|^2$ от угла φ не зависит, поэтому соответствующие интегралы обращаются в нуль. Для диагональных компонент

$$\begin{aligned} Q_{xx} &= r^2 (3 \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi - 1), \\ Q_{yy} &= r^2 (3 \sin^2 \vartheta \sin^2 \varphi - 1), \\ Q_{zz} &= r^2 (3 \cos^2 \vartheta - 1) \end{aligned}$$

интегрирование по φ дает множитель $1/2$, и так как

$$\frac{3}{2} \sin^2 \vartheta - 1 = -\frac{1}{2} (3 \cos^2 \vartheta - 1),$$

то интегралы $\langle Q_{xx} \rangle$ и $\langle Q_{yy} \rangle$ можно свести к интегралу $\langle Q_{zz} \rangle$:

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle. \quad (61.4)$$

Вводя сокращенное обозначение

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^{\infty} r^2 |\chi_l(r)|^2 dr, \quad (61.5)$$

мы, таким образом, имеем

$$\langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle \oint (3 \cos^2 \vartheta - 1) |Y_{l,m}|^2 d\Omega. \quad (61.6)$$

Интеграл в (61.6) легко вычислить, если воспользоваться соотношением

$$\cos \vartheta Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = a_{l,m} Y_{l+1,m} + a_{l-1,m} Y_{l-1,m}, \quad (61.7)$$

где

$$a_{l,m} = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}.$$

Учитывая ортогональность сферических функций, получаем

$$\langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle (a_{l,m}^2 + a_{l-1,m}^2)$$

и элементарное вычисление теперь дает

$$\langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle \cdot \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)}. \quad (61.8)$$

Мы видим, что квадрупольный момент отсутствует только у S -состояний ($m=l=0$), что является следствием сферической симметрии¹⁾. Для P -состояний мы, например, имеем

$$\langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle \cdot \frac{4}{5} \left(1 - \frac{3}{2} m^2\right).$$

Состояние с $m=0$, соответствующее распределению вытянутой формы, характеризуется положительным значением $\langle Q_{zz} \rangle$. У состояний с $m=\pm 1$ компонента $\langle Q_{zz} \rangle$ в 2 раза меньше по величине и отрицательна, что, очевидно, соответствует распределению сплюснутой формы. Это представляется вполне разумным, так как суперпозиция всех трех состояний приводит к сферически симметричной конфигурации (конфигурация замкнутой оболочки). На самом деле эффект замкнутой оболочки имеет место для любых значений l . Суммируя по всем состояниям, относящимся

¹⁾ Квадрупольный момент исчезает также при $l=3, m=2$, однако это является единственным исключением из правила по крайней мере вплоть до значений $l=16$.

к данной оболочке, получаем

$$\sum_{m=-l}^l \langle Q_{zz} \rangle = \frac{2 \langle r^2 \rangle}{(2l-1)(2l+3)} \sum_{m=-l}^l [l(l+1) - 3m^2],$$

но сумма, стоящая в правой части этого равенства, равна нулю, так как

$$\sum_{m=-l}^l m^2 = \frac{1}{3} l(l+1)(2l+1).$$

Задача 62. Частица внутри непроницаемой сферы

Определить уровни энергии частицы, находящейся в сферически симметричном потенциальном ящике с бесконечными стенками и радиусом R .

Решение. Уравнение Шредингера допускает разделение переменных, и его решение можно записать в виде

$$u(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi). \quad (62.1)$$

Радиальная волновая функция удовлетворяет уравнению

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (62.2)$$

в интервале $0 \leq r \leq R$ и равна нулю всюду вне его. Это уравнение после введения новой переменной $z = kr$ и замены

$$\chi_l = z^{1/2} \varphi(z)$$

можно привести к виду

$$\varphi'' + \frac{1}{z} \varphi' + \left[1 - \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{z^2} \right] \varphi = 0.$$

Но это есть уравнение Бесселя, решениями которого являются функции $J_{\pm \left(l + \frac{1}{2} \right)}(z)$. Таким образом, общее решение уравнения (62.2) можно записать в виде

$$\chi_l(r) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} [C_1 J_{l+1/2}(kr) + C_2 J_{-(l+1/2)}(kr)]. \quad (62.3)$$

Обычно вводят в рассмотрение так называемые сферические функции Бесселя:

$$\begin{aligned} j_l(z) &= \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{l+1/2}(z), \\ n_l(z) &= (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{-(l+1/2)}(z) \end{aligned} \quad (62.4)$$

с асимптотикой

$$j_l(z) \rightarrow \sin\left(z - \frac{l\pi}{2}\right), \quad n_l(z) \rightarrow -\cos\left(z - \frac{l\pi}{2}\right) \quad (62.5)$$

при больших положительных значениях z . Вблизи начала координат, когда $|z| \ll l + 1/2$, эти функции аппроксимируются первыми членами соответствующих степенных рядов:

$$j_l \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} z^{l+1}, \quad n_l \approx -\frac{(2l)!}{2^l l!} z^{-l}. \quad (62.6)$$

Второе слагаемое в решении (62.3) при $r \rightarrow 0$ дает вклад в $\chi_l \sim r^{-l}$ и в $u \sim r^{-l-1}$. Следовательно, чтобы обеспечить существование нормировочного интеграла

$$\int |u|^2 d\tau = \int_0^\infty |\chi_l|^2 dr = 1, \quad (62.7)$$

необходимо положить в формуле (62.3) $C_2 = 0$. Эти соображения, однако, не применимы к случаю $l = 0$, когда сингулярность функции u слишком слабо выражена и не может привести к расходимости интеграла в точке $r = 0$. Но и в этом случае мы должны исключить сингулярное решение, так как оно приводит к расходимости в точке $r = 0$ интеграла для среднего значения энергии¹⁾:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \int (\nabla u)^2 d\tau \quad (62.8)$$

(см. также задачу 65). Таким образом, в качестве нормируемого решения мы должны взять

$$\chi_l(r) = C j_l(kr). \quad (62.9)$$

Из этого набора решений собственные функции отбираются путем наложения условия

$$j_l(kR) = 0, \quad (62.10a)$$

или

$$J_{l+1/2}(kR) = 0. \quad (62.10b)$$

Для каждого фиксированного значения величины $l + 1/2$ функция Бесселя обладает бесконечным числом нулей, поэтому мы получаем бесконечное число значений $k_{n_r, l}$ и бесконечное число энергетических уровней

$$E_{n_r, l} = \frac{\hbar^2}{2m} k_{n_r, l}^2 \quad (62.11)$$

для каждого значения величины l ($n_r = 1, 2, 3 \dots$ — радиальное квантовое число, определяющее число нулей).

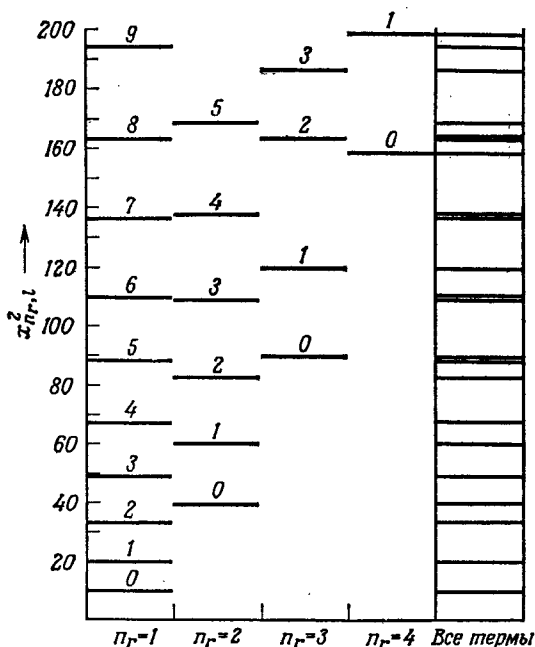
¹⁾ Для $l = 0$ и малых r это решение принимает вид $u \sim 1/r$, а интеграл для кинетической энергии записывается как $E \sim \int dr/r^2$.

Для низших значений l сферические функции Бесселя имеют вид

$$\begin{aligned} j_0(z) &= \sin z, & j_1(z) &= \frac{\sin z}{z} - \cos z, \\ j_2(z) &= -3 \frac{\cos z}{z} + \left(\frac{3}{z^2} - 1 \right) \sin z, \end{aligned} \quad (62.12)$$

а для более высоких значений l явный вид этих функций легко находится с помощью рекуррентного соотношения

$$j_l(z) = \frac{l}{z} j_{l-1}(z) - j'_{l-1}(z). \quad (62.13)$$



Фиг. 35. Энергетические уровни частицы внутри непроницаемой сферы.

Их нули можно определить, решая несложные трансцендентные уравнения:

$$\begin{aligned} j_0(z) &= 0, & \text{если } \sin z &= 0 \text{ или } z = \pi n_r, \\ j_1(z) &= 0, & \text{если } \operatorname{tg} z &= z, \\ j_2(z) &= 0, & \text{если } \operatorname{tg} z &= \frac{3z}{3-z^2} \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (62.14)$$

Все они стремятся либо к πl в случае четных l , либо к $(n + 1/2)\pi$ в случае нечетных l . На фиг. 35 показаны нижние энергетические уровни (в единицах $\hbar^2/2mR^2$), а значения пара-

метра

$$x_{n_r, l} = k_{n_r, l} R, \quad (62.15)$$

не превышающие 15, приведены в таблице

| $l \backslash n_r$ | 1 | 2 | 3 | 4 |
|--------------------|--------|--------|--------|--------|
| 0 | 3,142 | 6,283 | 9,425 | 12,566 |
| 1 | 4,493 | 7,725 | 10,904 | 14,066 |
| 2 | 5,764 | 9,095 | 12,323 | |
| 3 | 6,988 | 10,417 | 13,698 | |
| 4 | 8,183 | 11,705 | | |
| 5 | 9,356 | 12,967 | | |
| 6 | 10,513 | 14,207 | | |
| 7 | 11,657 | | | |
| 8 | 12,791 | | | |
| 9 | 13,916 | | | |

Замечание. Эта задача тесно связана с более простой одномерной проблемой, рассмотренной нами в задаче 18. Решения при $l=0$ точно соответствуют антисимметричным волновым функциям для одномерного случая.

Задача 63. Сферически симметричная прямоугольная яма конечной глубины

Для значений $l=0, 1, 2$ определить энергетические уровни связанных состояний в сферически симметричной прямоугольной яме

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (63.1)$$

Довести расчеты до численных результатов в том случае, когда характеристический параметр $2mV_0R^2/\hbar^2 = 100$.

Решение. Пусть

$$\frac{2m|E|}{\hbar^2} = \kappa^2, \quad \frac{2mV_0}{\hbar^2} = k_0^2, \quad \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} = k^2, \quad (63.2)$$

тогда радиальное уравнение Шредингера для связанных состояний внутри и вне ямы соответственно будет иметь вид

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0 \quad (63.3a)$$

и

$$\chi_l'' + \left(-\kappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi_l = 0. \quad (63.3b)$$

Уравнение (63.3а) с очевидным граничным условием $\chi_l(0) = 0$ имеет своим решением сферическую функцию Бесселя

$$\chi_l(r) = A j_l(kr), \quad r < R. \quad (63.4a)$$

Решением уравнения (63.3б), убывающим при больших значениях r как $e^{-\kappa r}$, является сферическая функция Ханкеля многого аргумента:

$$\chi_l(r) = B h_l^{(1)}(i\kappa r), \quad r > R. \quad (63.4б)$$

Фигурирующие здесь постоянные A и B следует определить, руководствуясь соображениями непрерывности и нормировки. Если записать условие непрерывности логарифмической производной на границе ямы ($r = R$), то указанные постоянные взаимно сократятся:

$$i\kappa R \frac{h_l^{(1)'}(i\kappa R)}{h_l^{(1)}(i\kappa R)} = kR \frac{j_l'(kR)}{j_l(kR)}. \quad (63.5)$$

Здесь штрих означает производную по соответствующим аргументам. Так как уравнение (63.5) связывает между собой κ и k , то оно тем самым фиксирует нам, согласно формулам (63.2), собственные значения энергии для каждой данной ямы.

Для низших значений l функции, фигурирующие в уравнении (63.5), имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} j_0(z) &= \sin z, & h_0^{(1)}(z) &= -ie^{iz}, \\ j_1(z) &= \frac{\sin z}{z} - \cos z, & h_1^{(1)}(z) &= \left(-\frac{i}{z} - 1\right)e^{iz}, \\ j_2(z) &= \left(\frac{3}{z^2} - 1\right)\sin z - \frac{3}{z}\cos z, & h_2^{(1)}(z) &= \left(-\frac{3i}{z^2} - \frac{3}{z} + i\right)e^{iz}. \end{aligned} \quad (63.6)$$

При больших значениях l можно воспользоваться рекуррентными формулами

$$\begin{aligned} j_{l+1}(z) &= \frac{2l+1}{z} j_l(z) - j_{l-1}(z), \\ h_{l+1}^{(1)}(z) &= \frac{2l+1}{z} h_l^{(1)}(z) - h_{l-1}^{(1)}(z). \end{aligned} \quad (63.7)$$

Если ввести сокращенные обозначения

$$kR = x, \quad k_0 R = x_0, \quad \frac{k}{k_0} = \xi, \quad \kappa R = x_0 \sqrt{1 - \xi^2}, \quad (63.8)$$

где x_0^2 — указанный в условии характеристический параметр, то уравнение (63.5) после элементарных, но довольно длинных выкладок можно привести к виду

$$\operatorname{tg}(x_0 \xi) = f_l(x_0 \xi) \quad (63.9)$$

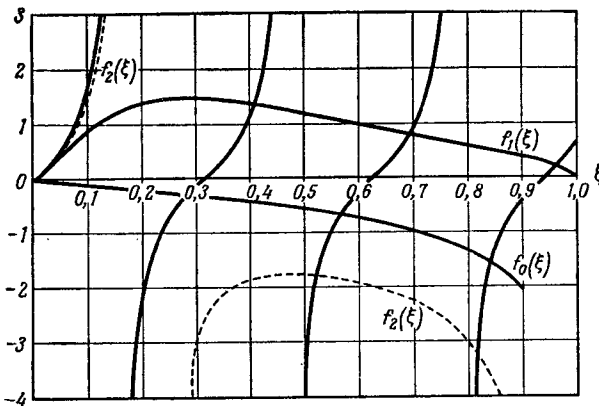
и

$$f_0(x_0, \xi) = -\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}, \quad (63.10a)$$

$$f_1(x_0, \xi) = \frac{x_0 \xi}{1 + \frac{\xi^2}{1-\xi^2} (1 + x_0 \sqrt{1-\xi^2})}, \quad (63.10б)$$

$$f_2(x_0, \xi) = x_0 \xi \frac{1 + x_0 \sqrt{1-\xi^2} + \frac{1}{3} x_0^2 \xi^2 (1-\xi^2)}{1 + x_0 \sqrt{1-\xi^2} \left[1 - \frac{1}{3} x_0^2 \xi^2 (1-\xi^2) \right]}. \quad (63.10в)$$

Значения переменной ξ , а тем самым и переменной x , удовлетворяющие этим уравнениям, проще всего находятся графическим методом.



Фиг. 36. Графическое определение собственных значений в случае сферически симметричной прямоугольной ямы конечной глубины.

На фиг. 36 дана функция $\text{tg } x_0 \xi$ для физической области изменения переменной, $0 \leq \xi \leq 1$, в случае $x_0 = 10$. Ее точки пересечения с функциями $f_l(\xi)$ находятся сначала непосредственно по фигуре, а затем их положение уточняется вплоть до четвертого знака при помощи табулирования рассматриваемых функций в окрестностях точек пересечения. Окончательные результаты для случая $x_0 = 10$ приведены в нижеследующей таблице. Сюда же для сравнения помещены и соответствующие результаты, относящиеся к сферически симметричному ящику с бесконечными стенками, полученные нами в предыдущей задаче.

| Яма конечной глубины, значения параметра x для | | | Ящик с бесконечными стенками, значения параметра x для | | |
|--|-------|-------|--|--------|-------|
| $l=0$ | $l=1$ | $l=2$ | $l=0$ | $l=1$ | $l=2$ |
| 2,853 | 4,070 | 5,226 | 3,142 | 4,493 | 5,764 |
| 5,679 | 6,958 | 8,124 | 6,283 | 7,725 | 9,095 |
| 8,422 | 9,625 | | 9,425 | 10,904 | |

Следует отметить, что в яме конечной глубины положение всех уровней несколько смещено вниз, поэтому нужно ожидать, что в рассматриваемом примере возможно появление связанных состояний, по крайней мере, вплоть до значений $l=5$, как это видно из таблицы, приведенной в предыдущей задаче, где значения параметра x даны для больших значений l .

Замечание. Эта задача тесно связана с более простой одномерной проблемой, рассмотренной нами в задаче 25. Наши решения при $l=0$ точно соответствуют антисимметричным решениям для одномерного случая.

Задача 64. Потенциал Вуда — Саксона

Сферически симметричная потенциальная яма описывается потенциалом

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}, \quad (64.1)$$

где $a \ll R$. Требуется определить энергию связанных состояний с $l=0$.

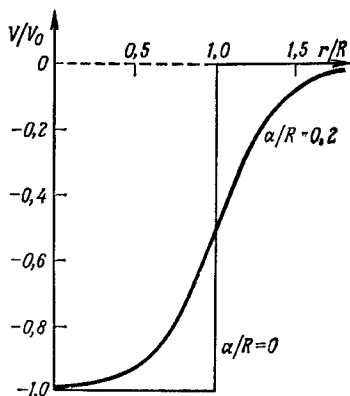
Замечание. Этот потенциал использовался для описания взаимодействия нейтрона с тяжелым ядром. Параметр R интерпретируется как радиус ядра, другой параметр a характеризует толщину поверхностного слоя, внутри которого потенциал падает от значения $V=0$ снаружи ядра до значения $V=-V_0$ внутри ядра (фиг. 37). При $a=0$ получается простая потенциальная яма со скачком потенциала на поверхности ядра.

Решение. После введения обозначений

$$u(r) = \frac{1}{r} \chi(r), \quad \frac{2mE}{\hbar^2} a^2 = -\beta^2, \quad \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 = \gamma^2 \quad (64.2)$$

уравнение Шредингера

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) u = 0$$



Фиг. 37. Потенциал Вуда—Саксона для случая $a/R=0,2$ и сферически симметричная прямоугольная яма, соответствующая случаю $a/R=0$

путем замены независимой переменной

$$y = \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}} \quad (64.3)$$

приводится к виду

$$y(1-y) \frac{d^2\chi}{dy^2} + (1-2y) \frac{d\chi}{dy} + \frac{-\beta^2 + \gamma^2 y}{y(1-y)} \chi = 0.$$

К этому уравнению необходимо присоединить граничные условия

$$\begin{aligned} \chi = 0 & \text{ при } y = 0 \quad (r = \infty), \\ \chi = 0 & \text{ при } y \approx 1 - e^{-\frac{R}{a}} \approx 1 \quad (r = 0). \end{aligned} \quad (64.4)$$

Полагая далее

$$\chi(y) = y^\nu (1-y)^\mu f(y), \quad (64.5)$$

получаем

$$\begin{aligned} y(1-y) f'' + [(2\nu+1) - y(2\nu+2\mu+2)] f' + \\ + \left[\nu(\nu-1) \frac{1-y}{y} + \mu(\mu-1) \frac{y}{1-y} - 2\mu\nu + \right. \\ \left. + \nu \frac{1-2y}{y} - \mu \frac{1-2y}{1-y} + \frac{-\beta^2 + \gamma^2 y}{y(1-y)} \right] f = 0. \end{aligned} \quad (64.6)$$

Если параметры ν и μ выбраны таким образом, что

$$\nu = \beta, \quad \mu^2 = \beta^2 - \gamma^2, \quad (64.7)$$

то множитель при f в уравнении (64.6) не будет зависеть от y и оно перейдет в гипергеометрическое уравнение

$$y(1-y) f'' + [(2\nu+1) - y(2\nu+2\mu+2)] f' - (\nu+\mu)(\nu+\mu+1) f = 0. \quad (64.8)$$

Соответствующее (ненормированное) решение имеет вид

$$\chi = y^\nu (1-y)^\mu {}_2F_1(\mu + \nu, \mu + \nu + 1, 2\nu + 1; y). \quad (64.9)$$

Другое независимое решение можно получить, заменяя ν на $-\nu$, однако оно не удовлетворяет первому из граничных условий (64.4). В случае больших значений r ($y \rightarrow 0$) равенство (64.9) дает

$$\chi \approx y^\nu, \quad y \sim \exp\left(-\frac{r-R}{a}\right), \quad \chi \sim e^{\beta R/a} \exp\left(-\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} r\right).$$

Таким образом, наше решение обладает правильным асимптотическим поведением.

Другому граничному условию при (или вблизи) $y=1$ удовлетворить не так просто. Чтобы выяснить поведение решения

(64.9) вблизи точки $y = 1$, мы воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned}
 {}_2F_1(\mu + \nu, \mu + \nu + 1, 2\nu + 1; y) &= \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu - \mu + 1) \Gamma(\nu - \mu)} \times \\
 &\quad \times {}_2F_1(\nu + \mu, \nu + \mu + 1, 2\mu + 1; 1 - y) + \\
 &+ \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu + \mu + 1) \Gamma(\nu + \mu)} (1 - y)^{-2\mu} {}_2F_1(\nu - \mu, \nu - \mu + 1, -2\mu + 1; 1 - y),
 \end{aligned}$$

в силу которого

$$\chi \approx \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu - \mu + 1) \Gamma(\nu - \mu)} (1 - y)^\mu + \frac{\Gamma(2\nu + 1) \Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu + \mu + 1) \Gamma(\nu + \mu)} (1 - y)^{-\mu}. \quad (64.10)$$

Чтобы проанализировать это выражение, прежде всего заметим, что $\gamma > \beta$, и поэтому величина μ , согласно равенству (64.7), является чисто мнимой:

$$\mu = i\lambda, \quad \lambda = \sqrt{\gamma^2 - \beta^2}. \quad (64.11)$$

Таким образом, можно написать

$$\begin{aligned}
 \chi \approx \frac{\Gamma(2\beta + 1) \Gamma(-2i\lambda)}{\Gamma(\beta + 1 - i\lambda) \Gamma(\beta - i\lambda)} \times \\
 \times \left[(1 - y)^{i\lambda} + \frac{\Gamma(2i\lambda) \Gamma(\beta + 1 - i\lambda) \Gamma(\beta - i\lambda)}{\Gamma(-2i\lambda) \Gamma(\beta + 1 + i\lambda) \Gamma(\beta + i\lambda)} (1 - y)^{-i\lambda} \right]. \quad (64.12)
 \end{aligned}$$

Вблизи точки $r = 0$ экспонента в правой части равенства (64.3) очень мала, поэтому здесь мы можем приближенно положить

$$1 - y \approx e^{-R/a}. \quad (64.13)$$

Пусть далее по определению,

$$\varphi = \arg \Gamma(\beta + i\lambda), \quad \psi = \arg \Gamma(2i\lambda). \quad (64.14)$$

Если теперь опустить множитель, стоящий перед квадратными скобками в выражении (64.12), что мы вполне можем сделать, так как наша функция не нормирована, и затем подставить туда вместо $1 - y$ выражение (64.13), то граничное условие нам даст

$$e^{-i \frac{\lambda R}{a}} + \exp\left(2i\psi - 4i\varphi - 2i \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{\beta}\right) e^{i \frac{\lambda R}{a}} = 0.$$

Отсюда для собственных значений получается уравнение

$$\exp\left[i\left(\psi - 2\varphi - \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{\beta}\right)\right] \cos\left(\frac{\lambda R}{a} + \psi - 2\varphi - \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{\beta}\right) = 0,$$

или

$$\frac{\lambda R}{a} + \psi - 2\varphi - \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{\beta} = (2n - 1) \frac{\pi}{2}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (64.15)$$

Это уравнение действительно устанавливает связь между β и λ , а следовательно, и между E и V_0 при данных значениях параметров R и a .

Формула (64.15) все еще мало пригодна для практического использования. Однако с помощью разложения¹⁾

$$\Gamma(x + iy) = \xi e^{i\eta},$$

$$\eta = y \left[-C + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{y} \operatorname{arctg} \frac{y}{x+n-1} \right) \right],$$

где $C = 0,5772 \dots$ — постоянная Эйлера, мы можем получить для аргументов φ и ψ Γ -функций удобные для практических целей явные выражения:

$$\psi = -\frac{\pi}{2} + 2\lambda \left[-C + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{2\lambda} \operatorname{arctg} \frac{2\lambda}{n} \right) \right],$$

$$\varphi = -\operatorname{arctg} \frac{\lambda}{\beta} + \lambda \left[-C + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{\lambda} \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{n+\beta} \right) \right].$$

Подставляя эти выражения в уравнение (64.15), получаем

$$\frac{\lambda R}{a} - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\operatorname{arctg} \frac{2\lambda}{n} - 2 \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{n+\beta} \right) + \operatorname{arctg} \frac{\lambda}{\beta} = n\pi. \quad (64.16)$$

Для дальнейшего анализа удобно ввести новые параметры:

$$k = \frac{\lambda}{a} = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) \right]^{1/2}, \quad \kappa = \frac{\beta}{a} = \left[\frac{2m}{\hbar^2} |E| \right]^{1/2},$$

$$k_0 = \frac{1}{a} \sqrt{\lambda^2 + \beta^2} = \left[\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \right]^{1/2}. \quad (64.17)$$

Эти параметры не зависят от толщины поверхностного слоя a и поэтому сохраняют смысл в предельном случае простой потенциальной ямы, когда $a \rightarrow 0$. Используя введенные параметры, уравнение (64.16) можно переписать в следующем виде:

$$\frac{kR}{\kappa R} = -\operatorname{tg} \left[kR - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\operatorname{arctg} \frac{2ka}{n} - 2 \operatorname{arctg} \frac{ka}{n+\kappa a} \right) \right]. \quad (64.18)$$

При $a \rightarrow 0$ сумма, стоящая в квадратных скобках, обращается в нуль, и мы возвращаемся к уравнению для уровней энергии в простой потенциальной яме:

$$\frac{kR}{\kappa R} = -\operatorname{tg} kR.$$

¹⁾ Это разложение можно легко вывести из стандартных формул, которые собраны в обычных математических справочниках, например у Янке—Эмде—Лёша или Магнуса—Обергеттингера.

Производя в (64.18) разложение в ряд по степеням малого параметра

$$\alpha = \frac{a}{R}, \quad (64.19)$$

окончательно находим

$$-\frac{x}{y} = \operatorname{tg} \left\{ x - 2\alpha^2 x \left[\zeta(2) y - \alpha \zeta(3) (x^2 + y^2) + \right. \right. \\ \left. \left. + \alpha^2 \zeta(4) (y^3 - x^2 y) - \alpha^3 \zeta(5) (y^4 - 2x^2 y^2 - 3x^4) + \right. \right. \\ \left. \left. + \alpha^4 \zeta(6) \left(y^5 - \frac{10}{3} x^2 y^3 + x^4 y \right) - \alpha^5 \zeta(7) (y^6 - 5x^2 y^4 + 3x^4 y^2 + 9x^6) \dots \right] \right\},$$

где в целях сокращения мы положили $kR = x$ и $\varkappa R = y$.

Задача 65. Изотропный осциллятор

Путем разделения переменных в сферических координатах решить уравнение Шредингера для осцилляторного потенциала

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2. \quad (65.1)$$

Решение. Обычная процедура разделения переменных

$$u(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi), \quad (65.2)$$

приводит к радиальному уравнению

$$\frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0. \quad (65.3)$$

При $l=0$ оно оказывается идентичным уравнению одномерного осциллятора (см. задачу 30). Когда же $l \neq 0$, центробежные силы отбрасывают частицу от центра, что ведет к существенно иным решениям.

Вводя обозначения

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad \frac{m\omega}{\hbar} = \lambda, \quad \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{E}{\hbar\omega} = \mu, \quad (65.4)$$

можно записать уравнение (65.3) в стандартном виде

$$\frac{d^2 \chi_l}{dr^2} + \left[k^2 - \lambda^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0. \quad (65.5)$$

Анализ поведения решения при $r=0$ и $r \rightarrow \infty$, которое определяется соответственно центробежным и осцилляторным членами, наводит на мысль искать решение в виде

$$\chi_l = r^{l+1} e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} v(r) \quad (65.6)$$

и по аналогии с одномерным случаем ввести вместо r новую

переменную

$$t = \lambda r^2. \quad (65.7)$$

В результате получаем уравнение Куммера

$$t \frac{d^2 v}{dt^2} + \left[\left(l + \frac{3}{2} \right) - t \right] \frac{dv}{dt} - \left[\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \mu \right] v = 0,$$

общее решение которого имеет вид

$$v = C_1 {}_1F_2 \left(\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \mu \right), l + \frac{3}{2}; \lambda r^2 \right) + \\ + C_2 {}_1F_1 \left(\frac{1}{2} \left(-l + \frac{1}{2} - \mu \right), -l + \frac{1}{2}; \lambda r^2 \right) r^{-(2l+1)} \quad (65.8)$$

Наличие второго слагаемого в этом выражении несовместимо при $r=0$ с условием нормировки¹⁾, поэтому $C_2=0$. Это существенно отличается от задачи об одномерном осцилляторе, где нет никаких граничных условий в начале координат.

Вырожденная гипергеометрическая функция при больших положительных значениях ее аргумента ведет себя как

$${}_1F_1(a, c; z) \rightarrow \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c},$$

что с учетом равенств (65.6) и (65.8) приводит к экспоненциально возрастающему решению

$$\chi_l \sim r^{l+1} e^{-\frac{1}{2} \lambda r^2} \cdot e^{\lambda r^2} r^{-(l + \frac{3}{2} + \mu)}.$$

Этого возрастания можно избежать лишь тогда, когда $a = -n_r$ ($n_r = 0, 1, 2, \dots$), т. е. в том случае, когда гипергеометрический ряд вырождается в полином степени n_r . Таким образом, имеем

$$\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \mu \right) = -n_r, \quad (65.9a)$$

так что с учетом выражений (65.4) уровни энергии будут равны

$$E = \hbar \omega \left(2n_r + l + \frac{3}{2} \right), \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (65.9b)$$

Число n_r можно назвать радиальным квантовым числом. Система энергетических уровней начинается с нулевой энергии $3/2 \hbar \omega$ (это соответствует наличию трех степеней свободы в нашей задаче) и так же, как в случае одномерного осциллятора, все уровни располагаются эквидистантно:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad (65.10)$$

где

$$n = 2n_r + l. \quad (65.11)$$

¹⁾ При $l=0$ второе слагаемое также нормируемо, однако его присутствие приводит к расходимости интеграла, соответствующего среднему значению кинетической энергии (см. также задачу 62).

Собрав вместе результаты, содержащиеся в формулах (65.6), (65.8) и (65.9а), приведем окончательное выражение для собственных функций

$$u(r, \vartheta, \varphi) = Cr^l e^{-\frac{\lambda}{2} r^2} {}_1F_1\left(-n_r, l + \frac{3}{2}; \lambda r^2\right) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad (65.12)$$

где постоянную C следует определять с помощью условия нормировки.

За исключением основного состояния, для которого $n=0$, все энергетические уровни *вырождены*, так как, согласно формуле (65.11), четные n можно получить $1/2 n + 1$ различными способами, а нечетные n можно получить $1/2 (n + 1)$ способами. Кроме того, следует учесть, что для каждого значения l имеется $2l + 1$ различных значений m , заключенных между $-l$ и $+l$, что приводит к дополнительному увеличению кратности вырождения.

Замечание. Полученные здесь результаты целесообразно сравнить с результатами задачи 42, где был рассмотрен изотропный осциллятор на плоскости.

Задача 66. Вырожденные состояния изотропного осциллятора

Показать, что собственную функцию изотропного осциллятора с квантовыми числами $l=2$, $m=0$, $n_r=1$ можно сконструировать как линейную комбинацию вырожденных функций, полученных разделением переменных в прямоугольных декартовых координатах.

Решение. В прямоугольных декартовых координатах уравнение Шредингера для изотропного осциллятора можно записать в виде

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (k_1^2 - \lambda^2 x^2) u \right] + \left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + (k_2^2 - \lambda^2 y^2) u \right] + \left[\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + (k_3^2 - \lambda^2 z^2) u \right] = 0, \quad (66.1)$$

где

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2,$$

а k^2 и λ обозначают те же величины, что и в предыдущей задаче. С помощью разделения переменных

$$u(x, y, z) = f(x) g(y) h(z) \quad (66.2)$$

для каждой из независимых переменных x , y и z мы получаем простые осцилляторные уравнения, первое из которых, например, имеет вид

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + (k_1^2 - \lambda^2 x^2) f = 0. \quad (66.3)$$

Соответствующие собственные значения равны $\hbar\omega (n_1 + 1/2)$, а n_1 —

целое неотрицательное число. Как было показано в задаче 30, (ненормированная) собственная функция уравнения (66.3) при четных $n_1 = 2n$ равна

$$f_{2n}(x) = e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right), \quad (66.4a)$$

а при нечетных $n_1 = 2n + 1$ равна

$$f_{2n+1}(x) = e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} x {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right). \quad (66.4b)$$

То же самое имеет место и для функций $g(y)$ и $h(z)$ (соответствующие квантовые числа мы будем обозначать посредством n_2 и n_3), поэтому полная энергия должна быть равна

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right). \quad (66.5)$$

С другой стороны, при разделении переменных в сферических координатах, как мы видели,

$$E_{n_r, l, m} = \hbar\omega \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right), \quad (66.6)$$

следовательно, в состоянии с квантовыми числами $l = 2$, $m = 0$, $n_r = 1$ мы имеем $2n_r + l = 4$, а соответствующая собственная функция, согласно формуле (65.12), равна

$$u = r^2 e^{-\frac{\lambda}{2}r^2} {}_1F_1\left(-1, \frac{7}{2}; \lambda r^2\right) P_2(\cos \vartheta). \quad (66.7)$$

Теперь наша задача состоит в том, чтобы записать выражение (66.7) в прямоугольных декартовых координатах и результат выразить в виде линейной комбинации функций $f(x) \cdot g(y) \cdot h(z)$, для которых

$$n_1 + n_2 + n_3 = 4. \quad (66.8)$$

Мы имеем

$$\begin{aligned} u &= e^{-\frac{\lambda}{2}r^2} \left(1 - \frac{2}{7}\lambda r^2\right) \left(\frac{3}{2}z^2 - \frac{1}{2}r^2\right) = \\ &= e^{-\frac{1}{2}\lambda r^2} \left(\frac{\lambda}{7}x^4 + \frac{\lambda}{7}y^4 - \frac{2\lambda}{7}z^4 + \frac{2\lambda}{7}x^2y^2 - \frac{\lambda}{7}y^2z^2 - \frac{\lambda}{7}x^2z^2 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}y^2 + z^2\right). \quad (66.9) \end{aligned}$$

В каждом произведении fgh присутствует один и тот же экспоненциальный множитель, который в дальнейшем, при сравнении функций, мы опустим. Так как $n_1 \leq 4$, то в формулах (66.4a) и (66.4b) первый параметр n вырожденной гипергеометрической функции не может превосходить 2. Эти же соображения, разумеется, относятся и к гипергеометрическим функциям, через которые выражаются функции $g(y)$ и $h(z)$. Поэтому нам при-

дется иметь дело лишь со следующими полиномами:

$$\begin{aligned}
 {}_1F_1\left(0, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) &= 1, \\
 {}_1F_1\left(-1, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) &= 1 - 2\lambda x^2, \\
 {}_1F_1\left(-2, \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) &= 1 - 4\lambda x^2 + \frac{4}{3}\lambda^2 x^4, \\
 x {}_1F_1\left(0, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right) &= x, \\
 x {}_1F_1\left(-1, \frac{3}{2}; \lambda x^2\right) &= x\left(1 - \frac{2}{3}\lambda x^2\right).
 \end{aligned} \tag{66.10}$$

Как показано в нижеследующей таблице, число 4 [см. формулу (66.8)] можно разбить на сумму трех целочисленных сла-

| n_1, n_2, n_3 | Собственные функции при разделении переменных в прямоугольных декартовых координатах (экспонента опущена) | Умножается на коэффициент |
|-----------------|---|---------------------------|
| 0 0 4 | $1 - 4\lambda z^2 + \frac{4}{3}\lambda^2 z^4$ | $-6/28\lambda$ |
| 0 1 3 | $yz\left(1 - \frac{2}{3}\lambda z^2\right)$ | 0 |
| 0 2 2 | $(1 - 2\lambda y^2)(1 - 2\lambda z^2)$ | $-1/28\lambda$ |
| 0 3 1 | $yz\left(1 - \frac{2}{3}\lambda y^2\right)$ | 0 |
| 0 4 0 | $1 - 4\lambda y^2 + \frac{4}{3}\lambda^2 y^4$ | $3/28\lambda$ |
| 1 0 3 | $xz\left(1 - \frac{2}{3}\lambda z^2\right)$ | 0 |
| 1 1 2 | $xy(1 - 2\lambda z^2)$ | 0 |
| 1 2 1 | $xz(1 - 2\lambda y^2)$ | 0 |
| 1 3 0 | $xy\left(1 - \frac{2}{3}\lambda y^2\right)$ | 0 |
| 2 0 2 | $(1 - 2\lambda x^2)(1 - 2\lambda z^2)$ | $-1/28\lambda$ |
| 2 1 1 | $yz(1 - 2\lambda x^2)$ | 0 |
| 2 2 0 | $(1 - 2\lambda x^2)(1 - 2\lambda y^2)$ | $2/28\lambda$ |
| 3 0 1 | $xz\left(1 - \frac{2}{3}\lambda x^2\right)$ | 0 |
| 3 1 0 | $xy\left(1 - \frac{2}{3}\lambda x^2\right)$ | 0 |
| 4 0 0 | $1 - 4\lambda x^2 + \frac{4}{3}\lambda^2 x^4$ | $3/28\lambda$ |

гаемых пятнадцатью различными способами. Так как интересующий нас полином (66.9) содержит только четные степени переменных x , y и z , то 9 функций, полученных разделением переменных в прямоугольных декартовых координатах, в которых фигурируют нечетные степени x , y и z (это те функции, где хотя бы одно из трех чисел n_1 , n_2 , n_3 нечетное), в искомую линейную комбинацию вклада не дадут. В последнем столбце таблицы мы приводим коэффициенты, на которые необходимо умножить соответствующие функции для того, чтобы их сумма оказалась равной полиному (66.9). Так как в нашем распоряжении имеется всего 6 слагаемых, а полином (66.9) содержит 10 членов, то у нас остается еще 4 соотношения, которые можно использовать для контроля правильности вычислений.

Замечание. Сопоставьте этот анализ с результатами задачи 42, где разбирался вопрос о вырожденных состояниях изотропного осциллятора на плоскости.

Задача 67. Проблема Кеплера

Решить уравнение Шредингера для связанных состояний электрона в поле бесконечно тяжелого точечного ядра с зарядом Ze . (При $Z=1$ мы имеем дело с теорией атома водорода.)

Решение. Введя обозначения

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = -\gamma^2, \quad \kappa = \frac{Ze^2m}{\gamma\hbar^2} = Z \frac{e^2}{\hbar c} \sqrt{-\frac{mc^3}{2E}} \quad (67.1)$$

и используя обычный способ разделения переменных

$$u = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad (67.2)$$

мы приходим к радиальному уравнению Шредингера вида

$$\chi_l'' + \left[-\gamma^2 + \frac{2\gamma\kappa}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0. \quad (67.3)$$

Это уравнение имеет регулярную особую точку при $r=0$ и существенно особую точку при $r=\infty$. Вблизи точки $r=0$ оно решается путем разложения в ряд, что приводит к решениям, которые пропорциональны либо r^{l+1} , либо r^{-l} . При $r \rightarrow \infty$ его решения ведут себя как $e^{\pm\gamma r}$. Только те решения, которые при малых значениях r ведут себя как r^{l+1} , а при больших значениях r как $e^{-\gamma r}$, можно нормировать в соответствии с условием¹⁾

$$\int_0^\infty \chi_l^2(r) dr = 1. \quad (67.4)$$

¹⁾ Решение с поведением типа r^{-l} при $l=0$ также может быть нормировано, однако в этом случае теряет смысл интеграл, описывающий среднее значение кинетической энергии, поэтому указанное решение тоже необходимо отбросить (см. задачу 62).

Таким образом, мы должны положить

$$\chi_l = r^{l+1} e^{-\nu r} f(r). \quad (67.5)$$

Если теперь вместо r ввести безразмерную переменную

$$z = 2\gamma r, \quad (67.6)$$

то придем к дифференциальному уравнению

$$zf'' + (2l + 2 - z)f' - (l + 1 - \kappa)f = 0, \quad (67.7)$$

которое представляет собой уравнение Куммера. Нам необходимо рассмотреть только одно решение этого уравнения, а именно

$$f = {}_1F_1(l + 1 - \kappa, 2l + 2; z), \quad (67.8)$$

так как только оно регулярно в начале координат, а о граничном условии мы уже позаботились, введя посредством формулы (67.5) новую неизвестную функцию. При больших значениях z вырожденная гипергеометрическая функция (67.8) ведет себя как e^z , что находится в противоречии с условием нормировки. Противоречие не возникает лишь в том случае, когда она вырождается в полином, т. е. когда

$$l + 1 - \kappa = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (67.9)$$

Так как величина κ в силу (67.1) связана с энергией, то уравнение (67.9) определяет искомые собственные значения. Если ввести *главное квантовое число*

$$n = n_r + l + 1, \quad (67.10)$$

то мы получим $\kappa = n$ или

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \cdot \frac{me^4}{\hbar^2}. \quad (67.11)$$

Энергетические уровни вырождены, так как каждому из них при $n > 1$ принадлежит несколько собственных функций:

$$u_{n, l, m} = Cr^l e^{-\nu r} {}_1F_1(l + 1 - n, 2l + 2; 2\gamma r) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi), \quad (67.12)$$

различающихся значениями орбитального квантового числа $l = 0, 1, \dots, n-1$ и магнитного квантового числа $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$. Таким образом, для каждого значения n всего имеется

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (67.13)$$

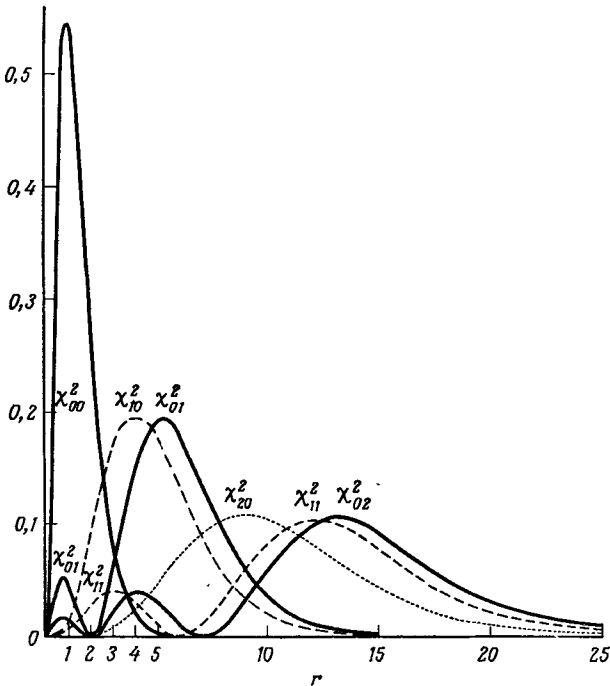
собственных функций. Только основное состояние с квантовыми числами $n = 1, l = 0, m = 0$ оказывается невырожденным.

Радиальные части волновых функций, нормированные в соот-

ветствии с условием (67.4) для значений $n=1, 2$ и 3 , приведены в таблице на стр. 183. Следует иметь в виду, что в ней мы пользуемся атомными единицами ($m=1, e=1, \hbar=1$), поэтому

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad \kappa = \frac{Z}{\gamma}, \quad \gamma = \frac{Z}{n}. \quad (67.14)$$

Графики некоторых функций $|\chi_{l,n,r}|^2$ приведены на фиг. 38. Кроме того, мы даем сводку явных выражений сферических



Фиг. 38. Функции $|\chi_{l,n,r}|$, описывающие радиальную плотность вероятности в случае атома водорода.

функций, нормированных согласно условию

$$\oint |Y_{l,m}|^2 d\Omega = 1.$$

Замечание. Относительно взаимного движения ядра и электрона около их общего центра масс см. задачу 150. Вопросы тонкой структуры и релятивистские эффекты разобраны в задачах 202 и 203. Теория строения атомов с двумя и более электронами, основанная на водородоподобных волновых функциях, рассматривается в задаче 154 и ряде следующих за ней задач.

Таблица водородоподобных функций

$$u_{n, l, m} = \frac{1}{r} \chi_{l, n_r}(r) Y_{l, m}(\theta, \varphi).$$

а) Радиальные части волновых функций для $n=1, 2, 3, 4$

| n | l | n_r | Символ | $\chi_{l, n_r}(r)$ |
|-----|-----|-------|--------|---|
| 1 | 0 | 0 | 1s | $2Z^{3/2} r e^{-Zr}$ |
| 2 | 0 | 1 | 2s | $\frac{1}{\sqrt{2}} Z^{3/2} r e^{-Zr/2} \left(1 - \frac{1}{2} Zr\right)$ |
| | | 0 | 2p | $\frac{1}{\sqrt{24}} Z^{3/2} r^2 e^{-Zr/2}$ |
| 3 | 0 | 2 | 3s | $\frac{2}{3\sqrt{3}} Z^{3/2} r e^{-Zr/3} \left(1 - \frac{2}{3} Zr + \frac{2}{27} Z^2 r^2\right)$ |
| | | 1 | 3p | $\frac{4}{27} \sqrt{\frac{2}{3}} Z^{3/2} r^2 e^{-Zr/3} \left(1 - \frac{1}{6} Zr\right)$ |
| | | 0 | 3d | $\frac{4}{81\sqrt{30}} Z^{7/2} r^3 e^{-Zr/3}$ |
| 4 | 0 | 3 | 4s | $\frac{1}{4} Z^{3/2} r e^{-Zr/4} \left(1 - \frac{3}{4} Zr + \frac{1}{8} Z^2 r^2 - \frac{1}{192} Z^3 r^3\right)$ |
| | | 2 | 4p | $\frac{1}{16} \sqrt{\frac{5}{3}} Z^{3/2} r^2 e^{-Zr/4} \left(1 - \frac{1}{4} Zr + \frac{1}{80} Z^2 r^2\right)$ |
| | | 1 | 4d | $\frac{1}{64\sqrt{5}} Z^{7/2} r^3 e^{-Zr/4} \left(1 - \frac{1}{12} Zr\right)$ |
| | | 0 | 4f | $\frac{1}{768\sqrt{35}} Z^{9/2} r^4 e^{-Zr/4}$ |

б) Угловые части волновых функций для $l=0, 1, 2, 3$

| l | m | $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ |
|-----|---------|--|
| 0 | 0 | $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ |
| 1 | 0 | $\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ |
| | ± 1 | $\pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$ |
| 2 | 0 | $\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}\right)$ |
| | ± 1 | $\pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$ |
| | ± 2 | $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$ |

Продолжение таблицы

| l | m | $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ |
|-----|---------|--|
| 3 | 0 | $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} (5 \cos^3 \vartheta - 3 \cos \vartheta)$ |
| | ± 1 | $\pm \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{\pi}} \sin \vartheta (5 \cos^2 \vartheta - 1) e^{\pm i\varphi}$ |
| | ± 2 | $\frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \sin^2 \vartheta \cos \vartheta e^{\pm 2i\varphi}$ |
| | ± 3 | $\pm \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \sin^3 \vartheta e^{\pm 3i\varphi}$ |

Задача 68. Потенциал Хюльтена

Решить уравнение Шредингера и определить уровни энергии в случае так называемого потенциала Хюльтена

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-r/a}}{1 - e^{-r/a}} \quad (68.1)$$

при $l=0$.

Решение. Мы будем пользоваться безразмерной переменной

$$x = \frac{r}{a} \quad (68.2a)$$

и введем обозначения

$$\alpha^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} a^2 > 0, \quad \beta^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2 > 0, \quad (68.2b)$$

причем будем считать, что $\alpha > 0$ и $\beta > 0$. Радиальное дифференциальное уравнение для функции $\chi(r) = r\psi(r)$ теперь можно записать в виде

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} + \left(-\alpha^2 + \beta^2 \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} \right) \chi = 0. \quad (68.3)$$

Замена переменной

$$e^{-x} = y \quad (68.4)$$

позволяет сделать коэффициенты уравнения рациональными функциями:

$$y^2 \frac{d^2\chi}{dy^2} + y \frac{d\chi}{dy} + \left(-\alpha^2 + \beta^2 \frac{y}{1-y} \right) \chi = 0. \quad (68.5)$$

Мы должны решить это уравнение при граничных условиях:

$$\chi = 0 \quad \text{при} \quad y = 0, \quad r \rightarrow \infty, \quad (68.6a)$$

$$\chi = 0 \quad \text{при} \quad y = 1, \quad r = 0. \quad (68.6b)$$

Решение находится с помощью подстановки

$$\chi = y^\alpha (1-y) \omega(y), \quad (68.7)$$

в результате которой уравнение (68.5) приводится к гипергеометрическому уравнению

$$y(1-y)w'' + [(2\alpha+1) - (2\alpha+3)y]w' - (2\alpha+1-\beta^2)w = 0. \quad (68.8)$$

Общее решение этого уравнения имеет вид

$$w(y) = A {}_2F_1(\alpha+1+\gamma, \alpha+1-\gamma, 2\alpha+1; y) + By^{-2\alpha} \times \\ \times {}_2F_1(-\alpha+1+\gamma, -\alpha+1-\gamma, -2\alpha+1; y), \quad (68.9)$$

где

$$\gamma = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}.$$

Первое граничное условие (68.6a) при $\alpha > 0$ дает $B=0$. Второе граничное условие (68.6б) требует более тщательного анализа в окрестности точки $y=1$. Это нетрудно сделать, воспользовавшись тождеством

$${}_2F_1(\alpha+1+\gamma, \alpha+1-\gamma, 2\alpha'+1; y) = \\ = \frac{\Gamma(2\alpha'+1)\Gamma(\varepsilon-1)}{\Gamma(\alpha-\gamma+\varepsilon)\Gamma(\alpha+\gamma+\varepsilon)} {}_2F_1(\alpha+1+\gamma, \alpha+1-\gamma, 2\alpha'+1; 1-y) + \\ + (1-y)^{\varepsilon-1} \frac{\Gamma(2\alpha'+1)\Gamma(1-\varepsilon)}{\Gamma(\alpha+1+\gamma)\Gamma(\alpha+1-\gamma)} {}_2F_1(\alpha-\gamma+\varepsilon, \alpha+\gamma+\varepsilon, \varepsilon; 1-y),$$

где $\varepsilon = 2(\alpha' - \alpha)$. Так как далее

$${}_2F_1(a, b, \varepsilon; 1-y) = 1 + \frac{ab}{\varepsilon}(1-y) + \dots,$$

то первый член в точке $y=1$ в пределе $\varepsilon \rightarrow 0$ становится равным

$$\frac{\Gamma(2\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+\gamma)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Gamma(\varepsilon-1)}{\Gamma(\alpha-\gamma+\varepsilon)}.$$

Поскольку

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Gamma(\varepsilon-1)}{\Gamma(\varepsilon-n)} = (-1)^{n+1} n!,$$

первый член будет конечным, если и только если

$$\alpha - \gamma = -n, \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

В знаменателе второго члена имеется множитель

$$\Gamma(\alpha+1-\gamma) \rightarrow \infty,$$

поэтому этот член обращается в нуль, за исключением случая $\alpha - \gamma = 0$, когда он равен

$$(1-y)^{-1} \frac{\Gamma(2\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1+\gamma)} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon(\alpha+\gamma+\varepsilon)}{\varepsilon}(1-y) + \dots \right\} \sim (1-y)^{-1},$$

и, следовательно, расходится при $y \rightarrow 1$. Таким образом, мы приходим к выводу, что при $n=0$ граничное условие (68.6б) не выполняется и поэтому собственные значения определяются из условия

$$\alpha - \gamma = -n, \quad n = 1, 2, 3 \dots, \quad (68.10)$$

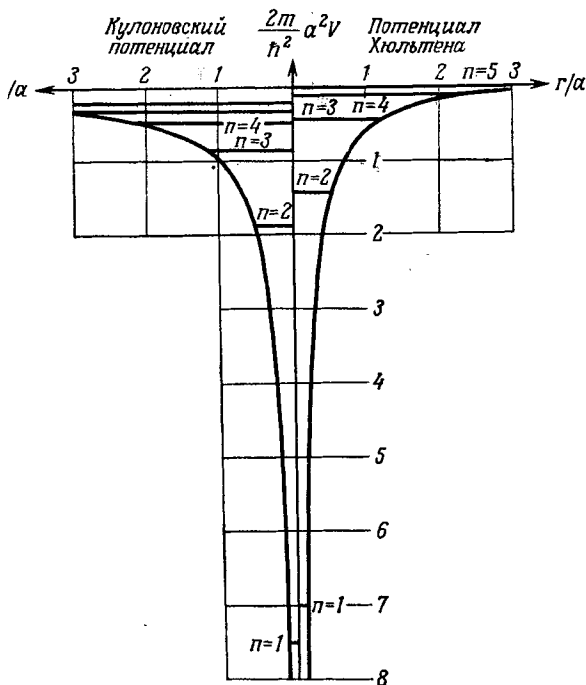
а принадлежащие им (ненормированные) собственные функции имеют вид

$$\chi = e^{-\alpha x} (1 - e^{-x}) {}_2F_1(2\alpha + 1 + n, 1 - n, 2\alpha + 1; e^{-x}). \quad (68.11)$$

Отметим, что в этом случае гипергеометрический ряд вырождается в полином относительно переменной e^{-x} .

Из условия (68.10) получаем

$$\alpha = \frac{\beta^2 - n^2}{2n}. \quad (68.12)$$



Фиг. 39. Кулоновский потенциал и потенциал Хюльтена с одинаковыми сингулярностями. Обратите внимание на сдвиг энергетических уровней

Так как $\alpha > 0$, то по необходимости должно выполняться неравенство

$$\beta^2 > n^2. \quad (68.13)$$

Оно означает, что для существования дискретных уровней энергии размеры потенциальной ямы должны превышать некий минимум, определяемый равенством $\beta^2 = 1$. Точнее говоря, неравенство (68.13) определяет число связанных состояний, реализующихся в потенциальной яме данных размеров. Используя равенства

(68.26), соотношение (68.12) можно записать в виде

$$E_n = -V_0 \left(\frac{\beta^2 - n^2}{2n\beta} \right)^2. \quad (68.14)$$

Потенциал Хюльтена при малых значениях r ведет себя напоdobие кулоновского потенциала

$$V_C = -\frac{V_0 a}{r},$$

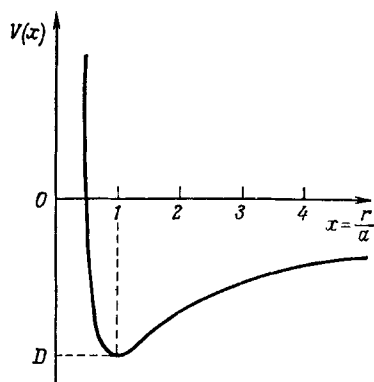
а при больших значениях r он убывает экспоненциально, поэтому в хюльтеновскую потенциальную яму „вмещается“ меньше связанных состояний, чем в кулоновскую. На фиг. 39 представлены для сравнения оба потенциала при числовом значении $\beta^2 = 30$: кулоновский потенциал изображен слева, а потенциал Хюльтена—справа. Здесь же показаны энергетические уровни: кулоновские уровни всегда располагаются ниже хюльтеновских, число которых остается конечным (в нашем примере их всего пять).

Задача 69. Молекулярный потенциал Кратцера

Для анализа вращательно-колебательного спектра двухатомной молекулы Кратцер предложил использовать потенциал вида

$$V(r) = -2D \left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^2} \right) \quad (69.1)$$

с минимумом $V(a) = -D$ (фиг. 40). Решить уравнение Шредингера, считая, что один из атомов значительно тяжелее другого (примером может служить молекула HJ). В этом предположении тяжелый атом можно считать неподвижным и связать с ним начало системы координат (в противном случае нам пришлось бы решать эквивалентную одночастичную задачу—см. подробности в задаче 150).



Фиг. 40. Молекулярный потенциал Кратцера.

Решение. Движение легкого атома массы m описывается уравнением Шредингера

$$\nabla^2 u + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + 2D \left(\frac{a}{r} - \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^2} \right) \right] u = 0, \quad (69.2)$$

допускающим разделение переменных

$$u = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (69.3)$$

Используя безразмерные величины

$$x = \frac{r}{a}, \quad \beta^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2} E, \quad \gamma^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} D, \quad (69.4)$$

где $\gamma > 0$, а β в случае связанных состояний действительно и также больше нуля, мы получаем для радиальной части волновой функции χ_l дифференциальное уравнение вида

$$\frac{d^2\chi_l}{dx^2} + \left[-\beta^2 + \frac{2\gamma^2}{x} - \frac{\gamma^2 + l(l+1)}{x^2} \right] \chi_l = 0. \quad (69.5)$$

Оно имеет существенно особую точку при $x = \infty$, вблизи которой нормируемые решения, соответствующие связанным состояниям, ведут себя как $e^{-\beta x}$, и другую особую точку при $x = 0$, где $\chi_l \sim x^\lambda$, а показатель λ является корнем характеристического уравнения

$$\lambda(\lambda - 1) = \gamma^2 + l(l + 1).$$

Из двух корней этого квадратного уравнения нам нужен лишь положительный корень:

$$\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}. \quad (69.6)$$

Так как $\lambda > 1$, то волновая функция обращается в нуль при $r = 0$, что объясняется наличием сильного отталкивания между атомами (см. фиг. 40). Приведенные соображения наводят на мысль положить

$$\chi_l(r) = x^\lambda e^{-\beta x} f(x). \quad (69.7)$$

Подстановка выражения (69.7) в уравнение (69.5) приводит к уравнению Куммера общего вида для вырожденной гипергеометрической функции:

$$xf'' + (2\lambda - 2\beta x)f' + (-2\lambda\beta + 2\gamma^2)f = 0. \quad (69.8)$$

Стандартная форма уравнения Куммера получается после замены x на $z = 2\beta x$. Таким образом, имеем

$$f = {}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}, 2\lambda; 2\beta x\right). \quad (69.9)$$

Теперь мы по отдельности разберем случаи отрицательных и положительных энергий.

а. Отрицательные энергии. Для связанных состояний $\beta > 0$ и решение (нормировка произвольная) принимает вид

$$\chi_l = x^\lambda e^{-\beta x} {}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta}, 2\lambda; 2\beta x\right). \quad (69.10)$$

Для больших значений x вырожденная гипергеометрическая функция пропорциональна $e^{2\beta x}$, поэтому функция χ_l неограниченно возрастает при $x \rightarrow \infty$, если функция ${}_1F_1$ не вырождается в поли-

ном. Когда же такое вырождение имеет место, функция χ_l стремится к нулю при $x \rightarrow \infty$ и решение действительно становится нормируемым. Следовательно,

$$\lambda - \frac{\gamma^2}{\beta} = -v, \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (69.11)$$

Соотношение (69.11) определяет собственные значения β и приводит к следующей формуле для энергетических уровней:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{\gamma^4}{(v+\lambda)^2};$$

эту формулу с учетом соотношения (69.6) можно записать в виде

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma^4 \left[v + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \gamma^2} \right]^{-2}. \quad (69.12)$$

Остановимся на анализе этой формулы несколько подробнее. Так как для большинства молекул $\gamma \gg 1$, то выражение (69.12) можно разложить в ряд по степеням $1/\gamma$. Это даст

$$E = D \left[-1 + \frac{2\left(v + \frac{1}{2}\right)}{\gamma} + \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^2} - \frac{3\left(v + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^2} - \frac{3\left(v + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\gamma^3} \dots \right]. \quad (69.13)$$

Выражение (69.1) для потенциала $V(r)$ также можно разложить вблизи минимума в точке $r = a$:

$$V(r) = D \frac{(r-a)^2}{a^2} - D. \quad (69.14)$$

Отсюда для классической частоты малых гармонических колебаний получается выражение

$$\omega = \sqrt{\frac{2D}{ma^2}}. \quad (69.15)$$

Заменяя в формуле (69.13) величины D и γ на частоту ω и момент инерции

$$\Theta = ma^2, \quad (69.16)$$

получаем

$$E = -\frac{1}{2} \Theta \omega^2 + \hbar \omega \left(v + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2\Theta} \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{3\hbar^2}{2\Theta} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{3\hbar^3}{2\Theta^2 \omega} \left(v + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \dots \quad (69.17)$$

Первый член в этом выражении является постоянной и непосредственно не сказывается на положении спектральных линий, хотя его значение и можно вычислить на основании спектроскопических данных. Второй член описывает колебательные уровни, характеризующиеся колебательным квантовым числом v . Третий член

соответствует вращательным уровням с постоянным моментом инерции [так как $(l + 1/2)^2 = l(l + 1) + 1/4$, то это слагаемое содержит еще один постоянный член]. Четвертый член ведет к некоторому понижению колебательных уровней, обусловленному ангармоничностью потенциала. Наконец, пятый член характеризует связь между вращениями и колебаниями, что опять-таки обусловлено ангармоничностью потенциала. Разумеется, наше разложение оказывается тем хуже, чем больше квантовые числа, особенно колебательное квантовое число v , и поэтому им нельзя пользоваться в случае энергий, близких к энергии диссоциации ($v \rightarrow \infty$). Однако для таких энергий вся модель вообще теряет смысл из-за нефизического характера поведения потенциала при очень больших и очень малых r .

В заключение приведем формулу для энергии диссоциации молекулы, получающуюся из выражения (69.17) при $v=0$, $l=0$:

$$E_{\text{дисс}} = \frac{1}{2} \Theta \omega^2 - \frac{1}{2} \hbar \omega + \frac{\hbar^2}{4\Theta} + \frac{3\hbar^3}{16\Theta^2\omega} + \dots \quad (69.18)$$

б. Положительные энергии. В этом случае β — чисто мнимая величина. Если ввести волновое число k , то, как показывает определение, мы можем написать $\beta = -ika$ и, следовательно, $\beta x = -ikr$. Вместо решения (69.10) теперь имеем

$$\chi_l = r^\lambda e^{ikr} {}_1F_1 \left(\lambda - i \frac{\gamma^2}{ka}, \quad 2\lambda; \quad -2ikr \right). \quad (69.19)$$

(Здесь нормировка по-прежнему произвольна). Как и раньше, в точке $r=0$ волновая функция обращается в нуль. Ее асимптотика определяется с помощью известной формулы

$${}_1F_1(a, c; z) \rightarrow e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} z^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c},$$

которая выполняется на всей комплексной плоскости z с разрезом вдоль положительной мнимой полуоси. Применение этой формулы к выражению (69.19) после довольно длинных преобразований дает

$$\chi_l \rightarrow C_l \cos \left(kr + \frac{\gamma^2}{ka} \ln 2kr - \frac{\lambda\pi}{2} - \eta_l \right), \quad (69.20)$$

где фазовый угол η_l определяется соотношением

$$e^{2i\eta_l} = \frac{\Gamma \left(\lambda + i \frac{\gamma^2}{ka} \right)}{\Gamma \left(\lambda - i \frac{\gamma^2}{ka} \right)}, \quad (69.21)$$

а C_l — (не представляющая интереса) нормировочная постоянная.

С точностью до логарифмического члена радиальные части волновых функций (69.20) оказываются периодическими, когда

расстояние между атомами велико. Логарифмическое искажение периодичности обусловлено тем, что рассматриваемый потенциал асимптотически подобен кулоновскому потенциалу (см. задачу 111). Интерпретируя потенциал Кратцера как потенциал взаимодействия пары ионов, каждый из которых имеет электрический заряд e , мы находим, что $2Da = e^2$ и $\gamma^2/ka = e^2/\hbar v$ (где v —скорость), и, таким образом, действительно можем отождествить логарифмический член формулы (69.20) с логарифмическим членом в кулоновском поле.

Замечание. Потенциал Кратцера сыграл большую роль на ранней стадии развития квантовой механики, так как он позволял получать точные решения даже в том случае, когда $l > 0$. Однако этот потенциал гораздо менее физичен, чем потенциал Морса, который тем не менее все еще достаточно прост, чтобы с его помощью можно было построить теорию рассматриваемого круга явлений. Потенциалу Морса будут посвящены две следующие задачи. Полученные там результаты, по крайней мере для связанных состояний, можно будет сравнить с результатами, найденными нами в случае потенциала Кратцера.

Литература

Kratzer A., Zs. Phys., 3, 289 (1920) (классическая трактовка задачи).
Fues E., Ann. Phys., 80, 367 (1929) (квантовая трактовка задачи).

Задача 70. Потенциал Морса

Колебания двухатомной молекулы прекрасно описывает потенциал Морса

$$V(r) = D(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x}), \quad x = \frac{r-r_0}{r_0}. \quad (70.1)$$

Решить уравнение Шредингера для связанных состояний при $l=0$. Для количественного анализа воспользоваться приведенными ниже экспериментальными данными для трех типичных молекул

| Молекула | $\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} \cdot \text{см}^{-1}$ | $D, \text{см}^{-1}$ | α |
|----------------|--|---------------------|----------|
| H ₂ | 60,8296 | 38292 | 1,440 |
| HCl | 10,5930 | 37244 | 2,380 |
| J ₂ | 0,0374 | 12550 | 4,954 |

Здесь M —приведенная масса атомов, а энергия дана, как это принято в спектроскопии, в см^{-1} [E (эВ) = E (см^{-1}) $\times 1,2398 \times 10^{-4}$].

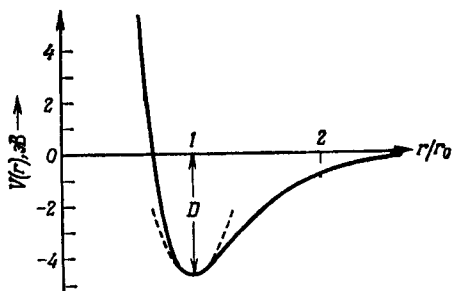
Решение. Начнем с небольшого обсуждения свойств потенциала, который впервые ввел Морс (фиг. 41). На больших расстояниях он соответствует силам притяжения, в точке $x=0$

($r = r_0$) у него имеется минимум, равный $-D$, и, наконец, при дальнейшем сближении атомов он приводит к сильному отталкиванию. В окрестности точки $x=0$ потенциал (70.1) можно разложить в ряд

$$V(r) = D(-1 + \alpha^2 x^2 \dots) = -D + \frac{1}{2} M \omega^2 (r - r_0)^2 + \dots, \quad (70.2)$$

где

$$\omega^2 = \frac{2D\alpha^2}{Mr_0^3}.$$



Фиг. 41. Потенциал Морса для молекулы HCl.
Пунктирная кривая — аппроксимирующая парабола.

Таким образом, для низких колебательных уровней энергетический спектр, как можно ожидать, будет не слишком отличаться от спектра гармонического осциллятора

$$E(v) = -D + \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (70.3)$$

с колебательным квантовым числом v . По мере роста энергии почти эквидистантные уровни становятся более плотными, что обусловлено ангармоничностью потенциала, не учтенной нами при написании формулы (70.2).

Введем теперь обозначения

$$\beta^2 = -\frac{2MEr_0^2}{\hbar^2} > 0, \quad \gamma^2 = \frac{2MDr_0^2}{\hbar^2}, \quad (70.4)$$

где по определению $\beta > 0$ и $\gamma > 0$, и перейдем от переменной r к переменной x , тогда радиальное уравнение Шредингера для случая $l=0$ запишется в виде

$$\frac{d^2\chi_0}{dx^2} + (-\beta^2 + 2\gamma^2 e^{-\alpha x} - \gamma^2 e^{-2\alpha x}) \chi_0 = 0. \quad (70.5)$$

Чтобы сделать коэффициенты этого дифференциального уравнения рациональными функциями, надо перейти к новой независимой переменной, которая простым образом выражается через функ-

цию $e^{-\alpha x}$. Если в качестве такой переменной взять выражение

$$y = \zeta e^{-\alpha x}, \quad \zeta = \frac{2\gamma}{\alpha}, \quad (70.6)$$

то уравнение (70.5) будет выглядеть особенно просто:

$$y^2 \chi_0'' + y \chi_0' + \left(-\frac{\beta^2}{\alpha^2} + \frac{\gamma}{\alpha} y - \frac{1}{4} y^2 \right) \chi_0 = 0.$$

Точки $y=0$ и $y=\infty$ являются особыми точками этого уравнения: в окрестности точки $y=0$ решение χ_0 должно быть пропорционально y^λ , где $\lambda = \pm \beta/\alpha$, а на бесконечности должно быть $\chi_0 \sim e^{\pm y/2}$. Таким образом, если положить

$$\chi_0 = y^{\beta/\alpha} e^{-1/2 y} F(y)$$

и ввести параметры

$$c = 2 \frac{\beta}{\alpha} + 1 \quad \text{и} \quad a = \frac{1}{2} c - \frac{\gamma}{\alpha}, \quad (70.7)$$

то функция $F(y)$ будет удовлетворять дифференциальному уравнению Куммера для вырожденной гипергеометрической функции в стандартной форме, поэтому полное решение уравнения (70.5) можно записать в виде

$$\chi_0 = y^{\beta/\alpha} e^{-1/2 y} \{ A_1 {}_1F_1(a, c; y) + A_2 {}_1F_1(a-c+1, 2-c; y) y^{1-c} \}. \quad (70.8)$$

Чтобы удовлетворить граничному условию $\chi_0=0$ при $r \rightarrow \infty$ или $y=0$, необходимо положить $A_2=0$, так как степень

$$\frac{\beta}{\alpha} + 1 - c = -\frac{\beta}{\alpha},$$

в которую возводится y , оказывается отрицательной. Значение постоянной A_1 фиксируется условием нормировки.

Второе граничное условие $\chi_0=0$ при $r=0$ ($x=-1$) или

$$y = y_0 = \zeta e^\alpha \quad (70.9)$$

приводит к соотношению

$${}_1F_1(a, c; y_0) = 0; \quad (70.10)$$

из него должны определяться собственные значения. Это соотношение является весьма сложным трансцендентным уравнением, о точном решении которого трудно сказать что-либо определенное. Однако для всех реальных молекул значения параметров α и γ таковы, что мы можем воспользоваться очень простым, но тем не менее весьма хорошим приближением.

В нижеследующей таблице представлены числовые значения ряда величин для трех типичных молекул, полученные на основании данных, приведенных в условии задачи.

| | γ | α | ξ | y_0 | y_0/ξ | G |
|----------------|----------|----------|-------|-------|-----------|-------|
| H ₂ | 25,09 | 1,440 | 34,9 | 147 | 4,22 | 5,6 |
| HCl | 59,30 | 2,380 | 49,8 | 539 | 10,80 | 270 |
| J ₂ | 579,51 | 4,954 | 234 | 33200 | 142 | 31240 |

Мы видим, что во всех случаях $y_0 \gg 1$. Чтобы можно было воспользоваться асимптотическим выражением для гипергеометрической функции (70.10), величина $|y_0|$ должна быть достаточно велика по сравнению со значениями параметров $|a|$ и $|c|$. Согласно формуле (70.7), оба параметра зависят от величины β , т. е. от собственных значений, которые нами пока еще не определены. Однако мы знаем, что во всяком случае должно выполняться неравенство

$$-D < E < 0, \quad \text{или} \quad 0 < \beta < \gamma, \quad (70.11)$$

так как энергия связанного состояния должна быть отрицательной и не может быть ниже минимума потенциальной энергии. Это ограничивает область изменения параметров a и c интервалами

$$1 < c < 1 + \xi \quad \text{и} \quad \frac{1}{2}(1 - \xi) < a < \frac{1}{2}. \quad (70.12)$$

Из таблицы видно, что ξ всегда остается значительно меньше y_0 (это верно даже в наиболее неблагоприятном случае молекулы водорода). Таким образом, для реальных значений y_0 у нас есть все основания воспользоваться асимптотическим разложением:

$${}_1F_1(a, c; y_0) \approx e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} y_0^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^{y_0} y_0^{a-c} = 0. \quad (70.13)$$

Полагая в уравнении (70.13)

$$c = \xi + 2a \quad \text{и} \quad y_0 = \xi e^\alpha,$$

можем записать его в виде

$${}_1F_1(a, \xi + 2a; \xi e^\alpha) \approx \Gamma(\xi + 2a) e^{-a(\alpha + \ln \xi)} \left\{ \frac{e^{-i\pi a}}{\Gamma(\xi + a)} + \frac{1}{\Gamma(a)} e^\xi (e^\alpha - \alpha - \ln \xi) \right\} = 0,$$

или

$$\Gamma(a) = -e^{i\pi a} \Gamma(a + \xi) e^\xi (e^\alpha - \alpha - \ln \xi). \quad (70.14)$$

Кроме того, мы имеем

$$a + \xi > \frac{1}{2}(1 + \xi) > \frac{1}{2},$$

и так как, согласно табличным данным, даже для водорода величина ξ настолько велика, что $a + \xi > 17,95$, то мы можем применить к функции $\Gamma(\frac{1}{2}(1 + \xi))$ формулу Стирлинга. Это дает

оценку

$$|\Gamma(a)| > \sqrt{2\pi} e^a,$$

причем показатель G , определяемый выражением

$$G = \frac{1}{2} \zeta \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \zeta) \right] - \frac{1}{2} (1 + \zeta) + \zeta (e^\alpha - \alpha - \ln \zeta), \quad (70.15)$$

мы можем вычислить, не имея никаких дополнительных сведений о собственных значениях; соответствующий цифровой материал приводится в последнем столбце нашей таблицы. Даже в наиболее неблагоприятном случае молекулы водорода мы имеем $|\Gamma(a)| > 675$. Следовательно, во всех случаях величина $|\Gamma(a)|$ очень большая, поэтому можно считать, что аргумент Γ функции a практически совпадает с одним из целых отрицательных чисел (напомним, что $a < 1/2$). Таким образом, получаем

$$a = -v, \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (70.16)$$

Следует иметь в виду, что ряд чисел v не является неограниченным, так как условие

$$a > \frac{1}{2} (1 - \zeta)$$

означает

$$v < \frac{1}{2} (\zeta - 1). \quad (70.17)$$

С помощью формул (70.16), (70.7) и (70.4) теперь получаем

$$-\beta^2 = -\gamma^2 + 2\gamma\alpha \left(v + \frac{1}{2} \right) - \alpha^2 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2,$$

и, следовательно, энергия выражается через колебательное квантовое число в виде

$$E(v) = -D + \frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} \left\{ 2\alpha\gamma \left(v + \frac{1}{2} \right) - \alpha^2 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}. \quad (70.18)$$

Первые два члена в этой формуле полностью согласуются с формулой (70.3) для гармонического осциллятора, поскольку

$$\frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} 2\alpha\gamma = \hbar\omega,$$

последний же член представляет собой поправку на ангармоничность колебаний. Если полученную формулу записать в виде

$$E(v) = -D + \hbar\omega \left\{ \left(v + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{\xi} \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right\}, \quad (70.19)$$

то на основании неравенства (70.17) можно заключить, что ангармонический член всегда меньше гармонического.

Литература

Morse P. M., Phys. Rev., 34, 57 (1929); см. также замечание в конце следующей задачи.

Задача 71. Ротационные поправки к формуле Морса

Вращательная энергия молекулы обычно значительно меньше ее колебательной энергии, поэтому в предыдущей задаче она вообще не учитывалась. Вращательную энергию можно включить в рассмотрение, либо прибегая к теории возмущений, либо заменив истинный центробежный потенциал некоторым приближенным выражением, позволяющим без существенных новых математических осложнений ввести величины β и γ из предыдущей задачи. Требуется проанализировать второй из указанных выше способов.

Решение. Если $l \neq 0$, то к потенциалу в радиальном уравнении Шредингера необходимо добавить центробежный член

$$V' = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}. \quad (71.1)$$

Используя обозначения, принятые в предыдущей задаче, его можно записать в виде

$$V'(r) = \frac{l(l+1)}{\gamma^2} D \left(\frac{r_0}{r} \right)^2. \quad (71.2)$$

Таким образом, этот член, если отбросить случай неоправданно больших l , крайне мал по сравнению с величиной D , так как значения r не слишком отличаются от r_0 . Даже в мало благоприятном случае молекулы водорода, когда γ лишь слегка превосходит 25, наше заключение остается в силе по крайней мере для тех l , которые существенно меньше 25. Следовательно, мы можем рассматривать центробежный потенциал в качестве малой поправки практически во всех случаях.

Расстояние r между атомами, конечно, не является постоянным, однако даже для довольно высоких колебательных уровней, как показывает детальное исследование собственных функций (70.8), оно не слишком отличается от равновесного расстояния r_0 . (Кстати, для классических точек поворота имеет место неравенство $x^2 = (2v+1)/\gamma\alpha^2 \ll 1$.) Таким образом, если разложить потенциал (71.1) вблизи точки $r=r_0$ в ряд по степеням величины $x = (r-r_0)/r_0$,

$$V' = \frac{l(l+1)}{\gamma^2} D \frac{1}{(1+x)^2} = \frac{l(l+1)}{\gamma^2} D (1 - 2x + 3x^2 - 4x^3 + \dots), \quad (71.3)$$

то в этом разложении нам достаточно будет учесть несколько первых членов. Теперь заменим потенциал $V'(r)$ выражением

$$\tilde{V}'(r) = \frac{l(l+1)}{\gamma^2} D (C_0 + C_1 e^{-\alpha x} + C_2 e^{-2\alpha x}), \quad (71.4)$$

где мы положили

$$C_0 = 1 - \frac{3}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2}, \quad C_1 = \frac{4}{\alpha} - \frac{6}{\alpha^2}, \quad C_2 = -\frac{1}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2}. \quad (71.5)$$

Так как выражение (71.4) разлагается в ряд в соответствии с формулой

$$\tilde{V}' = \frac{l(l+1)}{\gamma^2} D \left\{ 1 - 2x + 3x^2 - \left(3\alpha - \frac{2}{3}\alpha^2 \right) x^3 + \dots \right\},$$

то оно отличается от выражения (71.3) лишь членами порядка x^3 и выше. Используя потенциал \tilde{V}' вместо истинного центробежного потенциала V' , мы можем записать радиальное уравнение Шредингера при $l \neq 0$ в виде

$$\frac{d^2 \chi_l}{dx^2} + (-\beta_1^2 + 2\gamma_1^2 e^{-\alpha x} - \gamma_2^2 e^{-2\alpha x}) \chi_l = 0, \quad (71.6)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_1^2 &= \beta^2 + l(l+1)C_0, \\ \gamma_1^2 &= \gamma^2 - \frac{1}{2}l(l+1)C_1, \\ \gamma_2^2 &= \gamma^2 + l(l+1)C_2. \end{aligned} \quad (71.7)$$

Это дифференциальное уравнение по форме почти совпадает с уравнением (70.5), только вместо постоянных β и γ в нем стоят соответственно постоянные β_1 и γ_1, γ_2 , поэтому для его решения можно воспользоваться той же процедурой, что и раньше. Введем новую переменную

$$y = \zeta_2 e^{-\alpha x}, \quad \zeta_2 = \frac{2\gamma_2}{\alpha}, \quad (71.8)$$

а также параметры

$$\tilde{c} = \frac{2\beta_1}{\alpha} + 1, \quad \tilde{a} = \frac{1}{2}\tilde{c} - \frac{\gamma_1^2}{\alpha\gamma_2}. \quad (71.9)$$

и найдем решение

$$\chi_l = y^{\beta_1/\alpha} e^{-\frac{1}{2}y} {}_1F_1(\tilde{a}, \tilde{c}; y), \quad (71.10)$$

которое приводит к уравнению для определения собственных значений

$${}_1F_1(\tilde{a}, \tilde{c}; \tilde{y}_0) = 0, \quad \text{где } \tilde{y}_0 = \zeta_2 e^\alpha. \quad (71.11)$$

Так как параметры \tilde{a} и \tilde{c} отличаются от параметров a и c только малыми поправками, то все качественные соображения относительно приближенного решения этого трансцендентного уравнения остаются в силе и в данном случае. Следовательно,

$$\tilde{a} = -v, \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (71.12)$$

и в силу равенств (71.9)

$$-\beta_1^2 = - \left[\frac{\gamma_1^2}{\gamma_2} - \alpha \left(v + \frac{1}{2} \right) \right]^2. \quad (71.13)$$

Отсюда видно, что в формуле для уровней энергии мы должны

величину γ заменить величиной

$$\frac{\gamma_1^2}{\gamma_2} \approx \gamma \left[1 - l(l+1) \frac{C_1 + C_2}{2\gamma^2} \right],$$

а величину β^2 — выражением, стоящим в правой части равенства (71.13). С учетом формулы (71.7) это дает

$$\begin{aligned} -\beta^2 = & -\gamma^2 + 2\alpha\gamma \left(v + \frac{1}{2} \right) - \alpha^2 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \\ & + l(l+1)(C_0 + C_1 + C_2) - \frac{\alpha}{\gamma} (C_1 + C_2) \left(v + \frac{1}{2} \right) l(l+1) - \\ & - \frac{(C_1 + C_2)^2}{4\gamma^2} l^2(l+1)^2. \end{aligned}$$

Выражая здесь постоянные C_i через α в соответствии с определениями (71.5), мы окончательно получаем следующую формулу для уровней энергии:

$$E = \frac{\hbar^2}{2Mr_0^2} \left\{ -\gamma^2 + 2\alpha\gamma \left(v + \frac{1}{2} \right) - \alpha^2 \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + l(l+1) - \right. \\ \left. - \frac{3(\alpha-1)}{\alpha\gamma} \left(v + \frac{1}{2} \right) l(l+1) - \frac{9(\alpha-1)^2}{4\alpha^2\gamma^2} l^2(l+1)^2 \right\}. \quad (71.14)$$

В первой строке здесь стоят в точности те же члены, что и полученные нами в предыдущей задаче: глубина потенциальной ямы ($-D$), гармонический член и антигармоническая поправка. Во второй строке стоят три новых члена: вращательная энергия, соответствующая фиксированному расстоянию между атомами r_0 , член, обусловленный связью колебаний с вращениями, и, наконец, нелинейная поправка к вращательным уровням. Два последних члена дают отрицательный вклад, так как большим квантовым числам соответствуют такие состояния, в которых среднее расстояние между атомами несколько превосходит равновесное расстояние r_0 .

Замечание. Одно из возможных обобщений потенциала Морса применительно к колебаниям двухатомных молекул рассмотрено в работе Флюгге [Flügge S., Walger P., Weiguny A., Journ. Molec. Spectrosc., 23, 243 (1967)].

Задача 72. Потенциал Юкавы

Дан потенциал Юкавы

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-r/a}}{r/a}, \quad (72.1)$$

соответствующий наличию притяжения между двумя частицами (например, между двумя нуклонами). В рамках вариационной процедуры Ритца найти для случая $l=0$ оптимальное решение, используя пробную волновую функцию

$$u = \frac{1}{r} \chi(r), \quad (72.2)$$

где

$$\chi = Cre^{-\alpha r},$$

а α — вариационный параметр Ритца. При каком минимальном размере потенциальной ямы возможно существование связанных состояний? (В системе центра масс проблема сводится к одночастичному уравнению Шредингера с приведенной массой m^* , см. задачу 150.)

Решение. Прежде всего найдем постоянную C с помощью условия нормировки

$$\int_0^{\infty} \chi^2 dr = 1.$$

Отсюда имеем

$$C = 2\alpha^{3/2}. \quad (72.3)$$

Среднее значение энергии E представляет собой сумму двух интегралов:

$$E_{\text{кин}} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \int_0^{\infty} \left(\frac{d\chi}{dr} \right)^2 dr, \quad (72.4)$$

$$E_{\text{потен}} = -V_0 \int_0^{\infty} \frac{e^{-r/a}}{r/a} \chi^2 dr.$$

Элементарное интегрирование дает

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} \alpha^2 - V_0 \frac{4a^3 \alpha^3}{(1+2a\alpha)^3}. \quad (72.5)$$

Для дальнейшего удобно ввести безразмерные переменные

$$p = 2a\alpha, \quad K = \frac{2m^* a^2}{\hbar^2} V_0. \quad (72.6)$$

Первая из них представляет собой отношение среднего радиуса потенциальной ямы к среднему радиусу той области, где волновая функция заметно отличается от нуля, вторая же характеризует эффективный размер потенциальной ямы. Теперь мы можем преобразовать равенство (72.5) к виду

$$\frac{E}{V_0} = \frac{1}{4K} p^3 - \frac{p^3}{2(1+p)^3}. \quad (72.7)$$

Используя в качестве вариационного параметра вместо величины α величину p , получим оптимальное решение из условия $dE/dp = 0$, которое сразу же дает

$$K = \frac{(1+p)^3}{p(p+3)}. \quad (72.8)$$

Если теперь выражение (72.8) подставить в формулу (72.7), то

оптимальное значение энергии будет равно

$$E = -V_0 \frac{\rho^3 (\rho - 1)}{4(\rho + 1)^3}. \quad (72.9)$$

Так как величина ρ по определению положительная, то связанные состояния могут существовать только в том случае, когда $\rho > 1$ или, как это следует из формулы (72.8), когда $K > 2$. В рассматриваемом приближении этим неравенством и определяется минимальный размер потенциальной ямы, в которой возможно существование связанных состояний. Ниже мы приводим цифровые данные, полученные по формулам (72.8) и (72.9).

| ρ | K | $-E/V_0$ | ρ | K | $-E/V_0$ |
|--------|-------|----------|--------|------|----------|
| 1,00 | 2,000 | 0 | 1,50 | 2,32 | 0,0270 |
| 1,05 | 2,025 | 0,0017 | 1,60 | 2,39 | 0,0349 |
| 1,10 | 2,050 | 0,0036 | 1,70 | 2,46 | 0,0438 |
| 1,15 | 2,08 | 0,0058 | 1,80 | 2,54 | 0,0532 |
| 1,20 | 2,11 | 0,0081 | 1,90 | 2,62 | 0,0633 |
| 1,30 | 2,18 | 0,0135 | 2,00 | 2,70 | 0,0740 |
| 1,40 | 2,24 | 0,0198 | 2,50 | 3,12 | 0,1364 |

Замечание. Использованное приближение является довольно хорошим. Если пробную функцию (72.1) заменить менее удачной функцией

$$\chi' = C'r^2 e^{-\alpha r}, \quad C'^2 = \frac{4}{3} \alpha^2,$$

то вариационная процедура даст

$$K = \frac{2(\rho + 1)^6}{3\rho^3(\rho + 5)} \quad \text{и} \quad E = -V_0 \frac{\rho^5(\rho - 3)}{8(\rho + 1)^5}.$$

Очевидно, в этом случае связанные состояния могут существовать только при условии $\rho > 3$, т. е. для значений

$$K > \left(\frac{4}{3}\right)^4 = 3,16.$$

Задача 73. Изотопический сдвиг границы рентгеновского излучения

В тяжелых атомах средний радиус орбиты K -электрона примерно в 100 раз превышает радиус ядра R . Следовательно, благодаря конечному размеру ядра энергетический уровень K -электрона должен претерпеть небольшое смещение. Рассчитать указанное смещение, считая электрический заряд равномерно распределенным по объему ядра. Кроме того, определить изотопическое смещение границы рентгеновского K -излучения таллия ($Z = 81$)

для двух изотопов с атомными весами $A = 203$ и $A = 205$, пользуясь для радиуса ядра формулой

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13} \text{ см.} \quad (73.1)$$

Эффектом экранировки K -электрона пренебречь.

Решение. Энергия взаимодействия электрона с ядром имеет вид

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r}, & r > R, \\ \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} \right), & r < R. \end{cases} \quad (73.2)$$

Начнем с невозмущенной задачи о движении электрона в поле точечного ядра ($R = 0$). В этом случае

$$V_0 = -\frac{Ze^2}{r} \quad (\text{всюду}), \quad (73.3)$$

$$u_0 = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\gamma r}, \quad \gamma = Z \frac{me^2}{\hbar^2}, \quad E_0 = -\frac{1}{2} Z^2 \frac{me^4}{\hbar^2}.$$

Здесь $u_0(r)$ и E_0 — соответственно волновая функция и энергия основного состояния келлеровской проблемы (см. задачу 67). Энергия возмущения равна разности

$$V - V_0 = \begin{cases} 0, & r > R, \\ \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} + \frac{R}{r} \right), & r < R. \end{cases} \quad (73.4)$$

Отсюда для сдвига энергетического уровня получаем

$$\Delta E = E - E_0 = \int u_0^2 (V - V_0) d\tau = 4\pi \int_0^R r^2 \frac{\gamma^3}{\pi} e^{-2\gamma r} \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} + \frac{R}{r} \right) dr. \quad (73.5)$$

В области интегрирования показатель $2\gamma r$ всегда меньше $2\gamma R \approx \approx 0,02$, поэтому в подынтегральном выражении (73.5) мы можем положить

$$e^{-2\gamma r} \approx 1.$$

Используя далее величину r/R в качестве переменной интегрирования, после элементарных вычислений получаем

$$\Delta E = \frac{2}{5} \gamma^3 Ze^2 R^2 = \frac{2}{5} Z^4 \frac{e^2}{a_0} \left(\frac{R}{a_0} \right)^2 = \frac{4}{5} Z^2 |E_0| \left(\frac{R}{a_0} \right)^2, \quad (73.6)$$

где $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ означает боровский радиус.

В случае $Z = 81$ формула (73.3) дает

$$E_0 = -Z^2 \cdot 13,60 \text{ эВ} = -88,3 \text{ кэВ}. \quad (73.7)$$

Полный сдвиг уровня ΔE для изотопа с атомным весом $A = 203$,

согласно формулам (73.1) и (73.6), оказывается равным

$$\Delta E = |E_0| \cdot 0,935 \times 10^{-4} = 8,25 \text{ эВ}. \quad (73.8)$$

Изотопический сдвиг, т. е. разность между значениями ΔE в случае $A = 203$ и в случае $A + \Delta A = 205$ получается отсюда дифференцированием:

$$S = \frac{d\Delta E}{dR} \cdot \frac{dR}{dA} \Delta A = \frac{2}{3} \frac{\Delta A}{A} \Delta E.$$

Для рассматриваемого примера это приводит к значению

$$S = 0,00656 \Delta E = 6,14 \times 10^{-7} |E_0|. \quad (73.9)$$

В то время как абсолютное значение энергии K -оболочки, согласно формуле (73.8), сдвигается вверх на вполне заметную величину $\Delta E/E \sim 10^{-4}$, разностный эффект для соседних изотопов S/E (который можно было бы обнаружить по расщеплению K -линии рентгеновского излучения, будь он достаточно велик) составляет, согласно (73.9), менее одной миллионной.

Замечание. Эффект экранировки, конечно, значительно больше рассмотренных сдвигов, однако он совершенно одинаков для обоих изотопов. Эксперимент для границы K -линии таллия дает значение 6310 ридберг, или 85,9 кэВ, вместо нашего неэкранированного значения (73.7). Что касается изотопического расщепления, то оно почти не зависит от этой поправки.

Задача 74. Основное состояние мезоатома

Вычислить энергию связи μ -мезона в $1s$ -состоянии в поле того же ядра ($Z = 81$), которое рассматривалось в предыдущей задаче.

а) Почему в этом случае нельзя использовать применявшуюся там теорию возмущений?

б) Применить вместо теории возмущений вариационный метод Ритца, взяв в качестве пробной функции выражение вида

$$u = C(1 + \alpha r)e^{-\alpha r}, \quad (74.1)$$

в котором считать величину α вариационным параметром.

Решение

а. Масса μ -мезона μ в 207 раз больше массы электрона m , и вместо атомных единиц длины и энергии

$$a_1 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5,29 \times 10^{-9} \text{ см}, \quad E_1 = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27,2 \text{ эВ},$$

мы теперь имеем мюонные единицы

$$\tilde{a}_1 = \frac{ma_1}{\mu} = 2,56 \times 10^{-11} \text{ см}, \quad \tilde{E}_1 = \frac{\mu}{m} E_1 = 5,63 \text{ кэВ}. \quad (74.2)$$

В невозмущенном состоянии (точечное ядро) средние радиусы электронной a_1/Z и μ -мезонной \tilde{a}_1/Z орбит в соответствующих

единицах в обоих случаях равны $1/Z = 1,236 \times 10^{-2}$. С другой стороны, радиус ядра $R = 7,05 \times 10^{-13}$ см в атомных единицах равен $1,33 \times 10^{-4}$, а в мюонных $2,75 \times 10^{-2}$. Таким образом, радиус электронной орбиты примерно в 100 раз превышает радиус ядра, а радиус μ -мезонной орбиты равен примерно половине ядерного радиуса. Следовательно, μ -мезон находится главным образом внутри, а электрон — вне ядра, поэтому μ -мезонная волновая функция определяется осцилляторным потенциалом внутри ядра, а электронная волновая функция — кулоновским потенциалом вне ядра.

Эти геометрические различия отражаются и на значениях энергии. Отношение $\Delta E/|E_0|$, равное для электрона [согласно формуле (73.8)] $^{4/5}Z^2(R/a_1)^2 = 0,935 \times 10^{-4}$, в случае μ -мезона будет равно $^{4/5}Z^2(R/\tilde{a}_1)^2 = 3,98$, следовательно, в этом последнем случае „возмущающая“ энергия не является малой по сравнению с энергией невозмущенного состояния, более того, она значительно превосходит ее.

б. Внутри ядра имеется осцилляторный потенциал

$$V_0(r) = \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2), \quad (74.3)$$

для которого волновая функция основного состояния (см. задачу 65) имеет вид

$$u_0(r) = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2}, \quad (74.4a)$$

где

$$\omega^2 = \frac{Ze^2}{\mu R^3}, \quad (74.4б)$$

а соответствующая энергия равна

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar\omega - \frac{3Ze^2}{2R}. \quad (74.4в)$$

Приближенно решение (74.4a) должно быть верным при малых значениях r , для которых его можно разложить в ряд

$$u_0 = \left(\frac{\mu\omega}{\hbar\pi}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{\mu\omega}{2\hbar}r^2 + \dots\right). \quad (74.5)$$

С другой стороны, при больших значениях r истинный потенциал стремится к нулю, а не к бесконечности, что имеет место в случае потенциала (74.3), поэтому поведение истинной волновой функции будет определяться множителем

$$e^{-\varkappa r}, \quad \text{где } \varkappa^2 = \frac{2\mu|E|}{\hbar^2}, \quad (74.6)$$

и она будет убывать значительно медленнее, чем функция (74.4a).

Разложение пробной функции (74.1) имеет теперь вид

$$u = C \left(1 - \frac{\alpha^2}{2} r^2 + \dots \right),$$

сравнение этого выражения с разложением (74.5) позволяет ожидать для α^2 значение, близкое к $\mu\omega/\hbar$. Кроме того, пробная функция в отличие от (74.6) асимптотически ведет себя как $e^{-\alpha r}$, что гораздо больше похоже на поведение истинной функции, чем поведение функции (74.4а), но хорошего результата от пробной функции можно, разумеется, ожидать только в том случае, если $\alpha \approx \kappa$.

В мюонных единицах, как следует из формул (74.4б) и (74.4в), $\omega = 1,98 \times 10^8$ и $E_0 = -1,46 \times 10^8$ и, следовательно, в соответствии с (74.6) $\kappa = 54$. Если для того, чтобы отождествить функции (74.4а) и (74.1) при малых значениях r , мы положим $\alpha^2 = \mu\omega/\hbar$, то в принятых единицах $\alpha = \sqrt{\omega}$ будет равно 44,5, что не так уж сильно отличается от $\kappa = 54$. Таким образом, у нас есть все основания ожидать, что пробная функция (74.1) обеспечивает хорошее описание реальной ситуации.

Заметим здесь же, что использованная далее вариационная процедура приводит к следующим значениям: $\alpha \approx 64$ и $\kappa \approx 60$.

Перейдем теперь непосредственно к приближенному вычислению энергии основного состояния, при этом мы всюду будем пользоваться мюонными единицами ($\mu = 1$, $\hbar = 1$, $e = 1$). Нормируя функцию (74.1), получаем

$$C^2 = \frac{\alpha^3}{7\pi}. \quad (74.7)$$

Вычисление среднего значения кинетической энергии дает

$$E_{\text{кин}} = -\frac{1}{2} \int u \nabla^2 u \, d\tau = \frac{3}{14} \alpha^2. \quad (74.8)$$

Что же касается вычисления среднего значения потенциальной энергии

$$E_{\text{потен}} = 4\pi \int_0^R r^2 u^2 \frac{Z}{2R} \left(\frac{r^2}{R^2} - 3 \right) dr - 4\pi \int_R^\infty r^2 u^2 \frac{Z}{r} dr,$$

то оно оказывается несколько более затруднительным. Однако, если перейти к безразмерным величинам

$$2\alpha r = x, \quad 2\alpha R = \lambda \quad (74.9)$$

и воспользоваться известной из анализа формулой

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n! e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{1}{2!} \lambda^2 + \dots + \frac{1}{n!} \lambda^n \right),$$

то это вычисление по существу становится элементарным. Окончательный результат можно представить в форме

$$E = \frac{3}{56R^2} [\lambda^2 + ZRf(\lambda)], \quad (74.10)$$

где

$$f(\lambda) = \left(\frac{216}{\lambda^2} - 28 \right) - e^{-\lambda} \left(\frac{216}{\lambda^2} + \frac{216}{\lambda} + 80 + 14\lambda + \lambda^2 \right). \quad (74.11)$$

Условие Ритца,

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0,$$

приводит к уравнению для определения λ

$$\frac{1}{ZR} = \frac{e^{-\lambda}}{\lambda^4} [216e^\lambda - \varphi(\lambda)], \quad (74.12)$$

где

$$\varphi(\lambda) = 216 + 216\lambda + 108\lambda^2 + 33\lambda^3 + 6\lambda^4 + \frac{1}{2}\lambda^5.$$

Для значения $ZR = 2,23$ из уравнения (74.12) мы получаем, что $\lambda \approx 3,5$. Этому соответствует минимизированное значение энергии $E = -1808$ мюонных единиц или $E = -10,18$ МэВ.

Замечание. Более детально эта задача, а также некоторые имеющиеся здесь тонкие эффекты рассмотрены Флюгге и Цикендратом [*Flügge S., Zickendraht W., Zs. Phys., 143, 1 (1955)*]. (Полезные сведения по данному кругу вопросов можно найти в обзорной статье Д. Д. Иваненко и Г. Е. Пустовалова [*УФН, 61, 27 (1957)*]. — *Прим. ред.*)

Задача 75. Модель дейтрона с центральным взаимодействием

Идеализируя реальную ситуацию, будем предполагать, что взаимодействие между нейтроном и протоном описывается сферически симметричным потенциалом

$$V(r) = -Ae^{-r/a}. \quad (75.1)$$

Решить уравнение Шредингера для эквивалентной одночастичной задачи (см. задачу 150) в случае связанных состояний с $l = 0$ (дейтрон). Экспериментально установлено, что существует только одно связанное состояние с энергией

$$E = -2,23 \text{ МэВ.}$$

Найти связь между параметрами A и a , при которой для энергии E получается указанное значение, считая, что значения a близки к 2 ферми (1 ферми = 10^{-13} см). Для установления искомого связи использовать три метода:

а) точное решение уравнения Шредингера;

б) приближенную волновую функцию вида

$$\tilde{u} = \frac{C}{r} (e^{-\gamma r} - e^{-2\gamma r}),$$

обладающую правильным асимптотическим поведением при надлежащем выборе γ ;

в) метод Ритца с однопараметрическим семейством экспонент в качестве пробных функций.

а. Точное решение. Полагая при $l=0$

$$u = \frac{1}{r} \chi(r), \quad (75.2)$$

мы имеем следующее уравнение Шредингера для эквивалентной одночастичной задачи:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2} (E + Ae^{-r/a}) \chi = 0, \quad (75.3)$$

где $m^* = \frac{1}{2} m$ — приведенная масса нуклонов (мы считаем, что массы нуклонов равны). Переходя к новой независимой переменной

$$y = e^{-r/2a}, \quad (75.4)$$

получаем

$$\frac{d^2\chi}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{d\chi}{dy} + \left(c^2 - \frac{q^2}{y^2} \right) \chi = 0, \quad (75.5)$$

где

$$c^2 = \frac{8m^*}{\hbar^2} Aa^2, \quad q^2 = -\frac{8m^*}{\hbar^2} Ea^2 > 0. \quad (75.6)$$

Уравнение (75.5) есть уравнение Бесселя с общим решением

$$\chi = C_1 J_q(cy) + C_2 J_{-q}(cy). \quad (75.7)$$

Согласно равенству (75.4), точке $y=0$ соответствует точка $r=\infty$, где функция χ должна обращаться в нуль. Следовательно, $C_2=0$ и волновая функция будет равна

$$u = \frac{C_1}{r} J_q(ce^{-r/2a}). \quad (75.8)$$

С другой стороны, точке $y=1$ соответствует точка $r=0$, где волновая функция u обязана быть конечной, поэтому для функции Бесселя должно выполняться равенство

$$J_q(c) = 0. \quad (75.9)$$

При заданных числовых значениях величин m^* и E мы на основании формул (75.6) имеем

$$q = 0,458a, \quad A = 2,23 \frac{c^2}{q^2}, \quad (75.10)$$

где значения a берутся в единицах ферми, а значения A в МэВ. Пусть нам задано значение величины a , тогда величину q мы

можем найти по формуле (75.10). Затем из уравнения (75.9) находим величину c и, наконец, снова с помощью формулы (75.10) определяем соответствующее значение глубины потенциальной ямы A . Следует подчеркнуть, что нужно брать наименьший корень уравнения (75.9), так как именно в этом случае получается наименьшее значение A , что соответствует потенциальной яме с одним-единственным связанным состоянием. Результаты численных расчетов значений величин A и a приводятся в нижеследующей таблице ¹⁾.

| q | a | c | A |
|-----|-------|-------|------|
| 0,2 | 0,436 | 2,707 | 409 |
| 0,4 | 0,873 | 2,999 | 125 |
| 0,6 | 1,310 | 3,283 | 67,0 |
| 0,8 | 1,747 | 3,560 | 44,5 |
| 0,9 | 1,963 | 3,696 | 37,5 |
| 1,0 | 2,180 | 3,832 | 32,7 |
| 1,1 | 2,40 | 3,966 | 28,1 |
| 1,2 | 2,62 | 4,099 | 26,1 |
| 1,4 | 3,05 | 4,363 | 21,7 |

б. Приближенное решение. Волновая функция

$$\tilde{u} = \frac{C}{r} \left(e^{-\frac{qr}{2a}} - e^{-\frac{qr}{a}} \right) \quad (75.11)$$

в точке $r=0$ имеет конечное значение,

$$\tilde{u}(0) = C \frac{q}{2a},$$

и убывает экспоненциально на больших расстояниях r , причем коэффициент спада имеет правильное значение:

$$\exp\left(-\frac{qr}{2a}\right) = \exp\left(-r \sqrt{\frac{2m^*|E|}{\hbar^2}}\right).$$

Нормировочная постоянная C получается из условия

$$4\pi \int_0^{\infty} r^2 \tilde{u}^2(r) dr = 1,$$

которое дает

$$C = \sqrt{\frac{3q}{2\pi a}}. \quad (75.12)$$

¹⁾ Решения уравнения (75.9) можно взять из таблиц Янке и Эмде. (Имеется перевод: Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф., Специальные функции, изд-во „Наука“, М., 1968.—Прим. перев.)

Теперь с помощью этой волновой функции мы определим среднее значение энергии, для которого имеет место формула

$$E = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 \left\{ \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{du}{dr} \right)^2 - Ae^{-r/a} u^2 \right\} dr. \quad (75.13)$$

Если в подынтегральное выражение (75.13) подставить точную волновую функцию (75.8), то в результате мы получили бы точное собственное значение E . Используя же приближенную функцию \tilde{u} (75.11), мы получаем приближенное собственное значение \tilde{E} , которое, согласно вариационному принципу Шредингера (см. задачу 2), должно несколько превышать точное собственное значение E .

Интеграл (75.13) с функцией (75.11) вычисляется элементарно, и окончательный результат имеет вид

$$\tilde{E} = \frac{\hbar^2}{4m^*a^2} q^2 - 6A \left\{ \frac{1}{1 + \frac{1}{q}} - \frac{2}{\frac{3}{2} + \frac{1}{q}} + \frac{1}{2 + \frac{1}{q}} \right\}. \quad (75.14)$$

Если теперь подставить сюда значения $a = 2,18$ ферми и $A = 32,7$ МэВ, найденные нами ранее, то для \tilde{E} получится значение $\tilde{E} = -2,18$ МэВ. Если же, с другой стороны, потребовать, чтобы формула (75.14) давала правильное значение энергии, $E = -2,23$ МэВ, при $q = 1$ и $a = 2,18$, то для этого придется глубину ямы A взять равной $\tilde{A} = 33,5$ МэВ. Таким образом, при правильном значении глубины потенциальной ямы у нас получается значение энергии, завышенное примерно на 2,5%, для получения же правильного значения энергии требуется потенциальная яма несколько большей глубины \tilde{A} .

в. Метод Ритца. В качестве пробных функций возьмем нормированные функции вида

$$\bar{u} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{8\pi a^3}} e^{-\frac{\alpha r}{2a}} \quad (75.15)$$

и определим значение параметра α из условия минимальности выражения (75.13) для среднего значения энергии E . Подставив выражение (75.15) в формулу (75.13), после элементарных вычислений получаем

$$\bar{E} = \frac{\hbar^2}{8m^*a^2} \alpha^2 - \frac{\alpha^2}{(1 + \alpha)^3} A \quad (75.16a)$$

и

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial \alpha} = \frac{\hbar^2}{4m^*a^2} \alpha - \frac{3A}{\alpha^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha}\right)^4} = 0, \quad (75.16b)$$

или

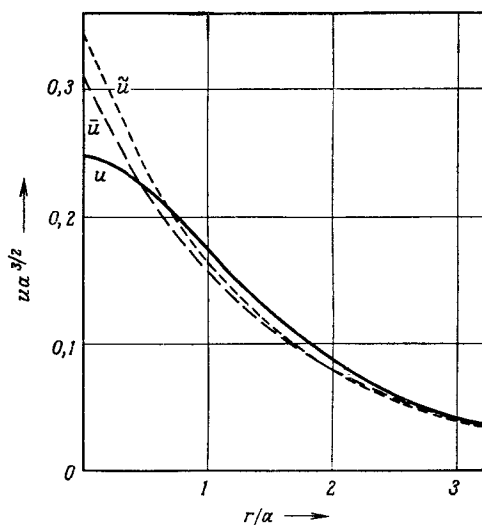
$$\frac{(\alpha+1)^4}{\alpha} = \frac{12m^*a^2A}{\hbar^2}. \quad (75.17)$$

Для значений $a = 2,18$ ферми и $A = 32,7$ МэВ правая часть равенства (75.17) будет равна 22,3, откуда следует, что $\alpha = 1,34$. Учитывая, что $\hbar^2/(8m^*a^2) = 2,21$ МэВ, мы в соответствии с формулой (75.16а) получаем для энергии значение

$$\bar{E} = 3,97 \text{ МэВ} - 6,15 \text{ МэВ} = -2,18 \text{ МэВ}.$$

Мы видим, что приближенное значение снова больше точного.

На фиг. 42 представлены графики всех трех волновых функций u (точная), \bar{u} , и \tilde{u} с учетом правильной нормировки (правиль-



Фиг. 42. Точная и две приближенные волновые функции для модели дейтрона с центральным взаимодействием.

ную нормировку для функции u можно найти лишь численным методом). Обе приближенные функции при малых r принимают слишком большие значения, что, однако, не играет особой роли, так как благодаря множителю r^2 в элементе объема практически не сказывается ни на нормировке, ни на величине интеграла (75.13). Кроме того, это отклонение компенсируется тем, что при больших r обе функции принимают заниженные значения. В асимптотическом поведении всех трех кривых не наблюдается сколько-

нибудь существенного различия:

$$ua^{3/2} \approx \bar{u}a^{3/2} \rightarrow 0,308 \frac{e^{-x}}{x}, \quad \bar{u}a^{3/2} \rightarrow 0,346 \frac{e^{-x}}{x},$$

где $x = r/2a$.

Задача 76. Импульсное представление для волновых функций в поле центральных сил

В обычном пространстве волновая функция разбивается на радиальную и угловую части, причем последняя представляет собой сферическую гармонику. Показать, что в импульсном пространстве волновая функция допускает точно такую же факторизацию.

Решение. Будем предполагать, что в формулах, осуществляющих связь между координатным и импульсным представлениями,

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{k}) d^3k \quad (76.1)$$

и

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u(\mathbf{r}) d^3x, \quad (76.2)$$

функция u имеет вид произведения:

$$u(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (76.3)$$

Чтобы найти фурье-образ этой функции, разложим экспоненту, фигурирующую в формуле (76.2), по сферическим гармоникам, которые, очевидно, будут функциями угла γ , образованного вектором \mathbf{r} и вектором \mathbf{k} (см. задачу 81). Это разложение имеет вид

$$e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\lambda+1)} i^{-\lambda} \frac{j_{\lambda}(kr)}{kr} Y_{\lambda,0}^*(\cos \gamma). \quad (76.4)$$

С помощью теоремы сложения сферических гармоник функцию $Y_{\lambda,0}(\cos \gamma)$ можно выразить через сферические углы ϑ, φ вектора \mathbf{r} и сферические углы Θ, Φ вектора \mathbf{k}

$$Y_{\lambda,0}(\cos \gamma) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda+1}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} Y_{\lambda,\mu}^*(\Theta, \Phi) Y_{\lambda,\mu}(\vartheta, \varphi). \quad (76.5)$$

Подставляя теперь формулу (76.5) в правую часть формулы (76.4), а затем полученный результат и выражение (76.3) в интеграл (76.2), получаем

$$f(\mathbf{k}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^{\infty} dr r^2 \oint \sum_{\lambda,\mu} i^{-\lambda} \frac{j_{\lambda}(kr)}{kr} Y_{\lambda,\mu}^*(\vartheta, \varphi) \frac{\chi_l}{r} \times \\ \times Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) Y_{\lambda,\mu}(\Theta, \Phi) d\Omega_r.$$

Интегрирование по направлениям вектора \mathbf{r} можно выполнить с помощью формулы

$$\oint Y_{\lambda, \mu}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) d\Omega_r = \delta_{l\lambda} \delta_{m\mu}.$$

В результате от двойной суммы у нас останется только один член с индексами l и m и мы получаем

$$kf(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^{-l} \int_0^{\infty} j_l(kr) \chi_l(r) \cdot Y_{l, m}(\Theta, \Phi) dr.$$

Таким образом, волновая функция $f(\mathbf{k})$ в пространстве импульсов может быть представлена в виде произведения

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} g_l(k) Y_{l, m}(\Theta, \Phi), \quad (76.6)$$

где

$$g_l(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^{-l} \int_0^{\infty} j_l(kr) \chi_l(r) dr. \quad (76.7)$$

Мы видим, что радиальные части волновых функций $g_l(k)$ и $i^{-l} \chi_l(r)$ связаны между собой преобразованием Ханкеля. Преобразование, обратное преобразованию (76.7), записывается в виде

$$\chi_l(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l \int_0^{\infty} j_l(kr) g_l(k) dk. \quad (76.8)$$

Если в координатном пространстве волновая функция u нормирована так, что допускается ее обычная вероятностная интерпретация, т. е.

$$\int_0^{\infty} |\chi_l(r)|^2 dr = 1, \quad (76.9)$$

то подстановка выражения (76.8) в формулу (76.9) даст

$$\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dr \int_0^{\infty} dk \int_0^{\infty} j_l(kr) g_l(k) j_l(k'r) g_l^*(k') dk' = 1.$$

Выполняя здесь сначала интегрирование по r и учитывая, что

$$\int_0^{\infty} j_l(kr) j_l(k'r) dr = \frac{\pi}{2} \delta(k - k'), \quad (76.10)$$

получаем

$$\int_0^{\infty} |g_l(k)|^2 dk = 1. \quad (76.11)$$

Таким образом, в пространстве импульсов правомерна та же самая вероятностная интерпретация: в рассматриваемом квантовом состоянии абсолютное значение импульса частицы будет обнаружено в интервале между k и $k+dk$ с вероятностью $|g_l(k)|^2 dk$.

Задача 77. Уравнение Шредингера в импульсном представлении в поле центральных сил

В задаче 14 было получено интегральное уравнение, которому в общем случае должны удовлетворять волновые функции импульсного представления. Показать, что в поле центральных сил решения этого уравнения можно представить в виде произведения

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} g_l(k) Y_{l,m}(\Theta, \Phi). \quad (77.1)$$

В частном случае атома водорода получить интегральное уравнение для функции $g_l(k)$.

Решение. Интегральное уравнение (14.6), записанное в атомных единицах, имеет вид

$$\left(\frac{1}{2}k^2 - E\right) f(\mathbf{k}) = - \int W(\mathbf{k} - \mathbf{k}') f(\mathbf{k}') d^3k', \quad (77.2)$$

где

$$W(\mathbf{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3x. \quad (77.3)$$

В том случае, когда потенциал $V(\mathbf{r})$ зависит только от модуля r радиус-вектора \mathbf{r} , оно сводится к интегральному уравнению для функции $g_l(k)$. Действительно, в этом случае в формуле (77.3) можно произвести интегрирование по телесному углу, так что в результате получится ядро, зависящее только от модуля вектора \mathbf{k} :

$$W(k) = \frac{4\pi}{8\pi^3} \int_0^\infty r^2 V(r) \frac{\sin kr}{kr} dr. \quad (77.4)$$

Но тогда ядро интегрального уравнения (77.2) будет функцией переменной

$$(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \gamma, \quad (77.5)$$

где γ — угол, образованный векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' , и ядро W можно будет разложить в ряд по полиномам Лежандра. Это разложение имеет вид

$$W(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(k, k') P_n(\cos \gamma), \quad (77.6)$$

причем коэффициенты разложения a_n зависят только от абсолютных значений k и k' . Именно это обстоятельство позволяет представить волновую функцию в виде произведения (77.1).

Подставляя в интегральное уравнение (77.2) вместо функции $f(\mathbf{k})$ ее выражение (77.1), получаем

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2}k^2 - E\right) \frac{1}{k} g_l(k) Y_{l,m}(\Theta, \Phi) = \\ = - \sum_n \int_0^\infty dk' k'^2 a_n(k, k') \frac{1}{k'} g_l(k') \oint P_n(\cos \gamma) Y_{l,m}(\Theta', \Phi') d\Omega'. \end{aligned}$$

Интеграл по углам можно вычислить с помощью теоремы сложения:

$$P_n(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2n+1} \sum_{\mu=-n}^n Y_{n,\mu}^*(\Theta', \Phi') Y_{n,\mu}(\Theta, \Phi).$$

В результате от суммы остается только член с индексами $n=l$ и $\mu=m$, и мы получаем

$$\frac{1}{k} g_l(k) Y_{l,m}(\Theta, \Phi) = - \frac{4\pi}{2l+1} \int_0^\infty k' a_l(k, k') g_l(k') Y_{l,m}(\Theta, \Phi) dk'.$$

По угловым переменным последнее равенство является тождеством, что подтверждает корректность представления (77.1). Что же касается функции $g_l(k)$, то для нее мы имеем интегральное уравнение

$$\left(\frac{1}{2}k^2 - E\right) g_l(k) = - \frac{4\pi k}{2l+1} \int_0^\infty k' a_l(k, k') g_l(k') dk'. \quad (77.7)$$

В частном случае атома водорода

$$V(r) = -\frac{1}{r}, \quad (77.8)$$

и интеграл (77.4) с помощью предельного перехода

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\varepsilon x} \sin x dx = 1$$

можно вычислить до конца, в результате получаем

$$W(k) = -\frac{1}{2\pi^2 k^2}. \quad (77.9)$$

Отсюда, согласно формуле (77.5),

$$W(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{2\pi^2 |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} = -\frac{1}{4\pi^2 k k' (z - \cos \gamma)}$$

и

$$z = \frac{k^2 + k'^2}{2kk'}. \quad (77.10)$$

Полагая $\cos \gamma = t$, замечаем, что в рассматриваемом случае равенство (77.6) представляет собой хорошо известное разложение

$$\frac{1}{z-t} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) Q_n(z) P_n(t), \quad (77.11)$$

коэффициентами которого служат так называемые функции Лежандра второго рода

$$Q_n(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_n(t) dt}{z-t}. \quad (77.12)$$

Следовательно, в нашем случае

$$a_n(k, k') = -\frac{1}{4\pi^2 k k'} (2n+1) Q_n\left(\frac{k^2 + k'^2}{2kk'}\right) \quad (77.13)$$

и интегральное уравнение окончательно принимает вид

$$\left(\frac{1}{2} k^2 - E\right) g_l(k) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} Q_l\left(\frac{k^2 + k'^2}{2kk'}\right) g_l(k') dk'. \quad (77.14)$$

Замечание. Интегральное уравнение (77.14) было решено В. Фоком [см. Zs. Phys., 98, 145 (1935)]. При таком подходе волновые функции в импульсном представлении находятся без помощи собственных функций в координатном представлении. Однако в случае кулоновского поля второй способ оказывается более простым, и мы рассмотрим его в следующей задаче.

Задача 78. Водородные волновые функции в импульсном пространстве

Найти импульсное представление волновых функций, принадлежащих низшим уровням (1s, 2s, 2p) атома водорода.

Решение. В задаче 76 мы уже показали, что в поле центральных сил волновой функции в координатном представлении

$$u(r) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \quad (78.1)$$

в импульсном представлении соответствует функция

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} g_l(k) Y_{l,m}(\Theta, \Phi), \quad (78.2)$$

поэтому нам остается определить лишь „радиальную“ функцию $g_l(k)$, связанную с функцией $\chi_l(r)$ преобразованием Ханкеля:

$$g_l(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^{-l} \int_0^{\infty} j_l(kr) \chi_l(r) dr. \quad (78.3)$$

Для трех заданных состояний, используя атомные единицы, можно написать

$$1s: \chi_{10}(r) = 2re^{-r},$$

$$g_{10} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} 2 \int_0^{\infty} r \sin kre^{-r} dr;$$

$$2s: \chi_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(r - \frac{1}{2} r^2 \right) e^{-r/2},$$

$$g_{20} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \left(r - \frac{1}{2} r^2 \right) \sin kre^{-r/2} dr;$$

$$2p: \chi_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} r^2 e^{-r/2},$$

$$g_{21} = -i \frac{1}{\sqrt{12\pi}} \int_0^{\infty} r^2 \left(\frac{\sin kr}{kr} - \cos kr \right) e^{-r/2} dr.$$

Вычисление этих интегралов элементарно, хотя и несколько громоздко. Результаты вычислений дают

$$g_{10}(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{4k}{(1+k^2)^2}, \quad (78.4a)$$

$$g_{20}(k) = \frac{32}{\sqrt{\pi}} \frac{k(1-4k^2)}{(1+4k^2)^3}, \quad (78.4б)$$

$$g_{21}(k) = -i \frac{128}{\sqrt{3\pi}} \frac{k^2}{(1+4k^2)^3}. \quad (78.4в)$$

Непосредственной проверкой можно убедиться, что во всех случаях выполняется условие нормировки

$$\int_0^{\infty} |g_{nl}(k)|^2 dk = 1, \quad (78.5)$$

как это и должно быть согласно общей теории [см. формулу (76.11)].

Задача 79. Штарк-эффект у пространственного ротатора

Во втором порядке теории возмущений рассчитать штарк-эффект у пространственного ротатора с электрическим дипольным моментом p .

Решение. Невозмущенному уравнению Шредингера удовлетворяют сферические гармоники:

$$\frac{\hbar^2}{2\Theta} L^2 Y_{l,m} = E_l Y_{l,m}, \quad (79.1)$$

причем для собственных значений имеет место формула

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\vartheta}. \quad (79.2)$$

Энергия возмущения при наличии произвольно направленного электрического поля \mathcal{E} равна

$$V = -p(\mathcal{E}_x \sin \vartheta \cos \varphi + \mathcal{E}_y \sin \vartheta \sin \varphi + \mathcal{E}_z \cos \vartheta). \quad (79.3)$$

Чтобы определить матричные элементы энергии возмущения V ,

$$\langle l', m' | V | l, m \rangle = \oint Y_{l', m'}^* V(\vartheta, \varphi) Y_{l, m} d\Omega, \quad (79.4)$$

воспользуемся соотношениями¹⁾

$$\begin{aligned} \sin \vartheta e^{i\varphi} Y_{l, m} &= a_{l, m} Y_{l+1, m+1} - a_{l-1, -m-1} Y_{l-1, m+1}, \\ \sin \vartheta e^{-i\varphi} Y_{l, m} &= -a_{l, -m} Y_{l+1, m-1} + a_{l-1, m-1} Y_{l-1, m-1}, \\ \cos \vartheta Y_{l, m} &= b_{l, m} Y_{l+1, m} + b_{l-1, m} Y_{l-1, m}, \end{aligned} \quad (79.5)$$

где

$$a_{l, m} = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}, \quad b_{l, m} = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}. \quad (79.6)$$

Если теперь учесть свойство ортонормированности сферических гармоник, то окажется, что для каждой данной пары квантовых чисел l и m отличными от нуля будут следующие шесть матричных элементов:

$$\begin{aligned} \langle l+1, m+1 | V | l, m \rangle &= -\frac{1}{2} (\mathcal{E}_x - i\mathcal{E}_y) p a_{l, m}, \\ \langle l-1, m+1 | V | l, m \rangle &= +\frac{1}{2} (\mathcal{E}_x - i\mathcal{E}_y) p a_{l-1, -m-1}, \\ \langle l+1, m-1 | V | l, m \rangle &= +\frac{1}{2} (\mathcal{E}_x + i\mathcal{E}_y) p a_{l, -m}, \\ \langle l-1, m-1 | V | l, m \rangle &= -\frac{1}{2} (\mathcal{E}_x + i\mathcal{E}_y) p a_{l-1, m-1}, \\ \langle l+1, m | V | l, m \rangle &= -\mathcal{E}_z p b_{l, m}, \\ \langle l-1, m | V | l, m \rangle &= -\mathcal{E}_z p b_{l-1, m}. \end{aligned} \quad (79.7)$$

Среди них нет ни одного диагонального матричного элемента ($l=l'$). Это означает, что поправка первого порядка теории возмущений равна нулю:

$$\Delta_1 E_l = \langle l, m | V | l, m \rangle = 0, \quad (79.8)$$

т. е. в рассматриваемом случае линейный эффект Штарка отсутствует. Это же утверждение сохраняет силу и для матричных

¹⁾ См., например, *Bethe H. A., Salpeter E. E.* в книге: *Encyclopedia of Physics*, vol. 35, Springer, Berlin—Göttingen—Heidelberg, 1957, p. 432. (Имеется перевод: *Бете Г., Солптер Э.*, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Физматгиз, 1960, стр. 542.—Прим. перев.)

элементов вида $\langle l, m' | V | l, m \rangle$, поэтому возмущение не приводит к смешиванию вырожденных состояний, принадлежащих одному и тому же значению l и разным значениям m . Следовательно, мы можем воспользоваться более простыми формулами теории возмущений без вырождения.

Таким образом, для расчета квадратичного эффекта Штарка мы будем иметь

$$\Delta_2 E_{l, m} = \sum_{l' m'} \frac{|\langle l', m' | V | l, m \rangle|^2}{E_l - E_{l'}}. \quad (79.9)$$

В этой сумме, согласно (79.7), содержатся шесть слагаемых, а их знаменатели находятся с помощью формулы (79.2), поэтому

$$\begin{aligned} \Delta_2 E_{l, m} = p^2 \frac{2\Theta}{\hbar^2} \left\{ \frac{1}{4} (\mathcal{G}_x^2 + \mathcal{G}_y^2) \left[\frac{a_{l, m}^2 + a_{l, -m}^2}{l(l+1) - (l+1)(l+2)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{a_{l-1, -m-1}^2 + a_{l-1, m-1}^2}{l(l+1) - (l-1)l} \right] + \right. \\ \left. + \mathcal{G}_z^2 \left[\frac{b_{l, m}^2}{l(l+1) - (l+1)(l+2)} + \frac{b_{l-1, m}^2}{l(l+1) - (l-1)l} \right] \right\}. \quad (79.10) \end{aligned}$$

Подставляя в последнее выражение значения коэффициентов $a_{l, m}$ и $b_{l, m}$ из (79.6), мы окончательно получаем

$$\Delta_2 E_{l, m} = \frac{p^2 \Theta}{2\hbar^2} (2\mathcal{G}_z^2 - \mathcal{G}_x^2 - \mathcal{G}_y^2) \frac{l(l+1) - 3m^2}{(2l+3)(2l-1)l(l+1)}. \quad (79.11)$$

Найденная формула не применима к случаю $l=0$. Это трудно понять, если принять во внимание, что в состоянии $Y_{0,0}$ нет никакого выделенного направления, поэтому возмущение должно быть просто пропорционально \mathcal{G}^2 . Вычисления, аналогичные выполненным выше, показывают, что в этом случае из шести матричных элементов (79.7) отличны от нуля только три матричных элемента $\langle 1, m' | V | 0, 0 \rangle$ с $m' = +1, 0, -1$. Окончательный результат имеет вид

$$\Delta_2 E_{0,0} = -\frac{p^2 \Theta}{3\hbar^2} \mathcal{G}^2. \quad (79.12)$$

Литература

Meunier K., Zs. Phys., 231, 154 (1970). В работе рассмотрен случай сильных полей, а также установлены границы применимости второго порядка теории возмущений.

б. Упругое рассеяние

Задача 80. Интерференция падающей и рассеянной волн

В задачах рассеяния на волновую функцию необходимо наложить асимптотическое граничное условие (так называемое

условие излучения Зоммерфельда)

$$u \rightarrow e^{ikz} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad kr \rightarrow \infty. \quad (80.1)$$

Показать, что на больших расстояниях от рассеивателя оно приводит к суперпозиции падающего и рассеянного потоков без заметной интерференции между ними, и установить соотношение между амплитудой рассеяния и сечением рассеяния.

Решение. К волновой функции, имеющей вид (80.1), можно применить формулу для плотности тока

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2mi} N (u^* \nabla u - u \nabla u^*), \quad (80.2)$$

в которой нормировочная постоянная N характеризует интенсивность потока частиц. В сферических координатах оператор градиента имеет компоненты:

$$\nabla_r = \frac{\partial}{\partial r}, \quad \nabla_\vartheta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \quad \nabla_\varphi = \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (80.3a)$$

Так как функция u не зависит от угла φ , то, очевидно, $s_\varphi = 0$. Для двух других компонент вектора \mathbf{s} с помощью формулы (80.2) после несложных вычислений получаются выражения

$$\begin{aligned} s_r &= \frac{\hbar k}{m} N \left(\cos \vartheta + \frac{|f|^2}{r^2} \right) + \frac{\hbar}{2m} N \left\{ f [kr(1 + \cos \vartheta) + i] \frac{e^{ik(r-z)}}{r^2} + \right. \\ &\quad \left. + f^* [kr(1 + \cos \vartheta) - i] \frac{e^{ik(z-r)}}{r^2} \right\}, \\ s_\vartheta &= -\frac{\hbar k}{m} N \sin \vartheta + \frac{\hbar}{2mi} N \left\{ (f' - ikr \sin \vartheta f) \frac{e^{ik(r-z)}}{r^2} - \right. \\ &\quad \left. - (f'^* + ikr \sin \vartheta f^*) \frac{e^{ik(z-r)}}{r^2} \right\} + \frac{\hbar}{2mir^3} N (f' f^* - f f'^*); \end{aligned}$$

здесь штрих означает производную по ϑ . Полученные формулы должны выполняться лишь асимптотически ($kr \rightarrow \infty$), поэтому мы можем пренебречь последним членом, который пропорционален r^{-3} , по сравнению с плотностью потока рассеянной волны, пропорциональной r^{-2} . Что касается интерференционных членов, стоящих в фигурных скобках, то мы оставим только те из них, которые содержат в качестве множителя величину kr . Таким образом, для дальнейшего анализа у нас остаются значительно более простые выражения

$$\begin{aligned} s_r &= \frac{\hbar k}{m} N \left\{ \cos \vartheta + \frac{|f|^2}{r^2} + \frac{1 + \cos \vartheta}{2r} (f e^{ik(r-z)} + f^* e^{ik(z-r)}) \right\}, \\ s_\vartheta &= \frac{\hbar k}{m} N \left\{ -\sin \vartheta - \frac{\sin \vartheta}{2r} (f e^{ik(r-z)} + f^* e^{ik(z-r)}) \right\}. \end{aligned} \quad (80.3b)$$

В этих формулах первые слагаемые не зависят от r . Они представляют собой r - и ϑ -компоненты направленного вдоль

оси z вектора плотности тока $s_0 = \hbar k N/m$, порожденного плоской волной. Так как $\hbar k/m = v$ есть скорость частицы, то величину N следует понимать как плотность падающих частиц. Второе слагаемое в выражении для s_r представляет собой радиальный поток, который мы можем отождествить с плотностью потока рассеянных частиц. При любого рода наблюдениях для получения конечной интенсивности мы должны по необходимости использовать какой-то детектор, который виден из рассеивателя под малым, но обязательно конечным телесным углом $\delta\Omega$. Если детектор находится на расстоянии r от рассеивателя, то в каждую секунду через его поверхность, равную $r^2\delta\Omega$, пройдет и будет зарегистрировано

$$\delta S = \int_{\delta\Omega} \left(\frac{\hbar k}{m} N \frac{|f|^2}{r^2} \right) r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} N \int_{\delta\Omega} |f|^2 d\Omega \quad (80.4)$$

рассеянных частиц. Разделив этот поток на плотность потока $(\hbar k/m)N$ падающих частиц, получим величину

$$\delta\sigma = \int_{\delta\Omega} |f(\vartheta)|^2 d\Omega \approx |f(\vartheta)|^2 \delta\Omega, \quad (80.5)$$

не зависящую от первичной интенсивности и являющуюся, таким образом, характеристикой рассеивающих свойств взаимодействия, вызывающего рассеяние. Это отношение имеет размерность площади и носит название *дифференциального сечения* рассеяния в телесный угол $\delta\Omega$. Отсюда для полного сечения рассеяния получаем

$$\sigma = \oint |f(\vartheta)|^2 d\Omega. \quad (80.6)$$

Нам осталось разобрать вопрос об интерференционных членах в формулах (80.3б), которые, будучи пропорциональными $1/r$, на первый взгляд играют даже более важную роль, чем члены, отвечающие плотности потока рассеянных частиц. Во всех этих членах имеются сомножители, меняющиеся медленно, и сомножители, меняющиеся быстро при изменении телесного угла. При интегрировании любого из них по малому, но конечному телесному углу $\delta\Omega$ медленно меняющиеся сомножители (такие, как $\sin \vartheta$) можно считать постоянными, так что остается лишь рассмотреть интегралы вида

$$\int_{\delta\Omega} \cos k(r-z) d\Omega \quad \text{или} \quad \int_{\delta\Omega} \sin k(r-z) d\Omega. \quad (80.7)$$

Если kr очень велико, то даже при интегрировании по сравнительно небольшому телесному углу $\delta\Omega$ изменения аргумента

$$k(r-z) = kr(1 - \cos \vartheta)$$

вызовут большое число осцилляций периодических функций, стоящих под знаком интеграла в (80.7). Следовательно, эти

интегралы практически будут равны нулю (во всяком случае, их вклад не будет пропорционален $\delta\Omega$), и поэтому в пределе очень больших kr мы вправе опустить интерференционные члены и рассматривать потоки от падающей и рассеянной волн как независимые.

В этой связи стоит, пожалуй, отметить, что

$$kr = \frac{2\pi r}{\lambda},$$

где λ — длина волны де Бройля, которая обычно имеет порядок атомных (или даже ядерных размеров, т. е., скажем, 10^{-8} см. Величина же r — это макроскопическое расстояние между частями экспериментальной установки, равное по крайней мере 10 см. Таким образом, величина kr равна $6 \cdot 10^9$ и, действительно, очень велика.

Задача 81. Разложение плоской волны по парциальным волнам

Разложить плоскую волну по парциальным волнам, соответствующим состояниям с определенным моментом количества движения.

Решение. Плоская волна

$$u = e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} \quad (81.1)$$

является решением уравнения Шредингера для свободного движения:

$$\nabla^2 u + k^2 u = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (81.2)$$

Общее решение этого уравнения, полученное путем разделения переменных в сферических координатах, имеет вид

$$u = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \{A_{l,m} j_l(kr) + B_{l,m} n_l(kr)\} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (81.3)$$

где

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{l+1/2}(kr); \quad n_l(kr) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{-(l+1/2)}(kr). \quad (81.4)$$

Каждый член суммы (81.3) представляет собой вклад состояния, характеризующегося вполне определенным моментом количества движения, т. е. квантовыми числами l и m .

Представляя плоскую волну (81.1) в виде разложения (81.3), сразу же можно добиться двух упрощений.

1. Вклад в сумму дают только слагаемые с $m=0$, так как выражение (81.1) не зависит от угла φ . Физически это связано с тем, что пучок частиц параллелен оси z , и поэтому проекция момента количества движения на ось z равна нулю.

2. Функции n_l , будучи сингулярными в начале координат, не могут давать вклада в искомое разложение.

Следовательно, разложение плоской волны по состояниям с определенным моментом должно иметь вид

$$e^{ikr \cos \vartheta} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta), \quad (81.5)$$

и наша задача сводится к определению коэффициентов A_l . С помощью условия ортонормированности

$$\int_{-1}^1 P_l(t) P_{l'}(t) dt = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}, \quad (81.6)$$

где $t = \cos \vartheta$, эта задача решается аналогично задаче об определении коэффициентов Фурье. Таким образом, имеем

$$\int_{-1}^1 e^{ikrt} P_l(t) dt = \frac{1}{kr} A_l j_l(kr) \cdot \frac{2}{2l+1}. \quad (81.7)$$

Чтобы определить коэффициент A_l из этого уравнения, следовало бы вычислить интеграл, стоящий слева, и результат интегрирования сравнить со сферической функцией Бесселя, стоящей справа. Эта процедура, будучи вполне элементарной, довольно громоздка. К счастью, использовать ее нет необходимости, так как нам достаточно сравнить выражения, стоящие в обеих частях равенства (81.7) при больших значениях произведения kr . В этом случае

$$j_l(kr) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad (81.8)$$

а наш интеграл последовательным интегрированием по частям можно представить в виде разложения по отрицательным степеням величины kr :

$$\int_{-1}^1 e^{ikrt} P_l(t) dt = \frac{1}{ikr} [e^{ikrt} P_l(t)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr} \left\{ \frac{1}{ikr} [e^{tkrt} \rho'_l(t)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^1 e^{tkrt} P_l''(t) dt \right\}.$$

Асимптотически важен лишь первый член этого разложения. Учитывая, что

$$P_l(\pm 1) = (\pm 1)^l,$$

мы, таким образом, получаем

$$\int_{-1}^1 e^{ikrt} P_l(t) dt \rightarrow \frac{1}{ikr} [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] = i^l \frac{2}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (81.9)$$

Подстановка выражений (81.8) и (81.9) в равенство (81.7) теперь дает

$$A_l = (2l + 1) i^l, \quad (81.10)$$

так что окончательно разложение (81.5) принимает вид

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \vartheta). \quad (81.11)$$

Если воспользоваться нормированным выражением для сферических гармоник

$$Y_{l,0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l, \quad (81.12)$$

то разложению (81.11) можно придать несколько иную форму:

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{l,0}(\vartheta). \quad (81.13)$$

Обоими разложениями (81.11) и (81.13) можно пользоваться с равным успехом.

Замечание 1. Из равенства (81.7) и соотношения (81.10) вытекает интегральное представление для сферических функций Бесселя

$$j_l(z) = i^{-l} \frac{z}{2} \int_{-1}^1 e^{izt} P_l(t) dt. \quad (81.14)$$

Метод, использованный нами при решении этой специальной задачи, часто применяется для нахождения подобных интегральных представлений.

Замечание 2. Для $m=0$ проекция момента количества движения на ось z равна нулю, $L_z=0$, две другие проекции, L_x и L_y , не имеют определенного значения. Это находит отражение и в классической картине, когда пучок падающих частиц расслаивают на тонкие цилиндрические слои радиуса ρ . Для каждого такого слоя, имеющего ось z в качестве оси симметрии, величина L имеет определенное значение ($L = m\rho v$), но при этом все еще допустимы всевозможные способы разбивания вектора L на компоненты L_x и L_y . Бесхитрое квантование, $L \approx \hbar l$, приводит к соотношению

$$\rho \approx \frac{\hbar l}{mv} = l \frac{\lambda}{2\pi},$$

где λ — длина волны де Бройля, а ρ является грубой мерой расстояния, на котором частица с квантовым числом l пролетает мимо начала координат.

Такое выделение из полной суммы одного отдельного члена разложения, разумеется, некорректно: наблюдаемые величины по необходимости выражаются через билинейные комбинации u и u^* (или их производные), что ведет к возникновению интерференционных членов. Только в пределе больших квантовых чисел l можно дать классическую интерпретацию отдельной парциальной волне. Дело в том, что высокие сферические гармоники быстро осциллируют, поэтому усреднение даже по небольшому интервалу углов приводит к выпадению интерференционных членов.

Замечание 3. Пусть плоская волна распространяется не в направлении оси z , а в направлении вектора \mathbf{k} со сферическими углами Θ и Φ . Если посредством ϑ' обозначить угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{r} , то в соответствии с формулой (81.13) будем иметь

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{l,0}(\vartheta').$$

Применяя к этому выражению теорему сложения сферических гармоник

$$\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} Y_{l,0}(\vartheta') = \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}^*(\Theta, \Phi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \tag{81.15}$$

получаем разложение более общего вида

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{l,m}^*(\Theta, \Phi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \tag{81.16}$$

Задача 82. Разложение амплитуды рассеяния по парциальным волнам

Пусть внутри сферы радиуса R имеется потенциал $V(r)$ и пусть вне этой сферы потенциал равен нулю. В этом потенциальном поле рассеивается пучок частиц, описываемый плоской волной. Воспользовавшись разложением в ряд по парциальным волнам, вычислить амплитуду рассеяния и выразить ее затем через значения логарифмических производных парциальных волн на сфере $r=R$.

Решение. В области $r < R$ волновую функцию можно записать в виде

$$u = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \chi_l(k, r) P_l(\cos \vartheta), \tag{82.1}$$

где

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r) \right] \chi_l = 0, \quad \chi_l(0) = 0. \tag{82.2}$$

Граничные условия определяют функции χ_l с точностью до постоянной амплитуды, но логарифмические производные,

$$L_l = \left(\frac{d \ln \chi_l}{d \ln r} \right)_{r=R}, \tag{82.3}$$

от этой постоянной амплитуды не зависят. Ниже предполагается, что величины L_l известны.

Вне сферы $r=R$ можно написать

$$u = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[j_l(kr) + \frac{1}{2} \alpha_l h_l^{(1)}(kr) \right] P_l(\cos \vartheta). \tag{82.4}$$

Если бы все $\alpha_l = 0$, это выражение совпадало бы с разложением плоской волны из задачи 81; члены, пропорциональные сферическим функциям Ханкеля первого рода, соответствуют наличию дополнительных расходящихся сферических волн. Действительно,

$$h_l^{(1)}(kr) = j_l(kr) + in_l(kr) \rightarrow i^{-l+1} e^{ikr}. \quad (82.5a)$$

Вспомнив далее асимптотическое поведение функций j_l

$$j_l(kr) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad (82.5b)$$

находим, что на больших расстояниях разложение (82.4) для u ведет себя как

$$u \rightarrow \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [(1+\alpha_l) e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] P_l(\cos \vartheta). \quad (82.6)$$

Основываясь на законе сохранения числа частиц при упругом рассеянии, можно заключить, что квадраты модулей амплитуд сходящихся и расходящихся волн должны совпадать, а именно

$$|1 + \alpha_l|^2 = 1. \quad (82.7)$$

Другими словами, должно выполняться равенство

$$\alpha_l = e^{2i\delta_l} - 1, \quad (82.8)$$

с учетом которого разложение (82.6) можно записать в более компактной форме

$$u \rightarrow \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) P_l(\cos \vartheta), \quad (82.9)$$

где величины δ_l , как очевидно, представляют собой асимптотический сдвиг фаз решения уравнения (82.2) по отношению к решению (82.5б) уравнения Шредингера для свободного движения.

Амплитуда рассеяния $f(\vartheta)$ связана с рассеянной волной u_s соотношением

$$u_s \equiv u - e^{ikz} \rightarrow f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (82.10)$$

поэтому

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \alpha_l P_l(\cos \vartheta). \quad (82.11a)$$

С учетом равенства (82.8) эту формулу можно записать несколько иначе:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta). \quad (82.11b)$$

Теперь нам осталось выразить коэффициенты α_l через логарифмические производные L_l , определенные посредством формулы (82.3). Последняя задача решается с помощью условий непрерывности функций χ_l и $d\chi_l/dr$ на поверхности сферы $r=R$. Мы имеем

$$\chi_l(k, R) = j_l(kR) + \frac{1}{2} \alpha_l h_l^{(1)}(kR),$$

$$\frac{d\chi_l(k, R)}{dr} = k \left[j_l'(kR) + \frac{1}{2} \alpha_l h_l^{(1)'}(kR) \right].$$

Здесь штрих означает производную не по r , а по kr . Деля второе из приведенных соотношений на первое, имеем

$$L_l = x \frac{j_l'(x) + \frac{1}{2} \alpha_l h_l^{(1)'}(x)}{j_l(x) + \frac{1}{2} \alpha_l h_l^{(1)}(x)}, \quad x = kR, \quad (82.12a)$$

и отсюда находим

$$\alpha_l = -2 \frac{L_l j_l(x) - x j_l'(x)}{L_l h_l^{(1)}(x) - x h_l^{(1)'}(x)}. \quad (82.12b)$$

Разумеется, полученное выражение опять удовлетворяет закону сохранения числа частиц (82.7). В этом нетрудно убедиться, введя сферические функции Ханкеля второго рода и исключив функции $j_l(x)$ с помощью соотношения

$$j_l(x) = \frac{1}{2} [h_l^{(1)}(x) + h_l^{(2)}(x)], \quad (82.13)$$

если учесть, что при действительных значениях аргумента функции $h_l^{(2)}(x)$ комплексно сопряжены с функциями $h_l^{(1)}(x)$. Действительно, в соотношении

$$1 + \alpha_l = - \frac{L_l h_l^{(2)}(x) - x h_l^{(2)'}(x)}{L_l h_l^{(1)}(x) - x h_l^{(1)'}(x)} \quad (82.14)$$

числитель дроби комплексно сопряжен с ее знаменателем, поэтому $|1 + \alpha_l| = 1$ в полном согласии с равенством (82.7).

Задача 83. Рассеяние при низких энергиях

Разложение амплитуды рассеяния по сферическим гармоникам сходится тем лучше, чем меньше параметр $x = kR$. Убедиться в справедливости этого утверждения прямым вычислением коэффициентов α_l при $x \ll 1$ и получить разложение коэффициентов α_0 и α_1 по степеням x , считая, что коэффициент α_2 мал и им можно пренебречь.

Решение. Мы начнем с формулы (82.12б) предыдущей задачи:

$$\alpha_l = -2 \frac{L_l j_l(x) - x j_l'(x)}{L_l h_l^{(1)}(x) - x h_l^{(1)'}(x)}. \quad (83.1)$$

Воспользуемся определениями

$$h_l^{(1)}(x) = j_l(x) + in_l(x), \quad h_l^{(2)}(x) = j_l(x) - in_l(x) \quad (83.2a)$$

и заменим сферические функции Ханкеля функциями j_l и n_l , для которых степенные разложения имеют вид

$$\begin{aligned} j_l &= A_l x^{l+1} \left[1 - \frac{x^2}{2(2l+3)} + \frac{x^4}{8(2l+3)(2l+5)} \cdots \right], \\ n_l &= -B_l x^{-l} \left[1 + \frac{x^2}{2(2l-1)} + \frac{x^4}{8(2l-1)(2l-3)} \cdots \right], \end{aligned} \quad (83.2б)$$

где

$$A_l = \frac{2^l l!}{(2l+1)!}, \quad B_l = \frac{(2l)!}{2^l l!}. \quad (83.2в)$$

Если $x \ll 1$, то достаточно учесть только первый член каждого ряда. В этом случае имеем

$$j_l \ll |n_l| \quad \text{и} \quad h_l^{(1)} \approx in_l,$$

следовательно,

$$\begin{aligned} L_l j_l - x j_l' &\approx (L_l - l - 1) A_l x^{l+1}, \\ i(L_l h_l^{(1)} - x h_l^{(1)'}) &\approx -i(L_l + l) B_l x^{-l}, \end{aligned}$$

поэтому из формулы (83.1) с учетом соотношений (83.2в) вытекает

$$\alpha_l = -\frac{2i}{2l+1} \left(\frac{2^l l!}{(2l)!} \right)^2 \frac{L_l - (l+1)}{L_l + 1} x^{2l+1}. \quad (83.3)$$

В этой формуле сохранен лишь основной член, а все более высокие степени x отброшены.

Как мы знаем, для амплитуды рассеяния имеет место разложение

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \alpha_l P_l(\cos \vartheta). \quad (83.4)$$

При $x \ll 1$ этот ряд очень хорошо сходится, так как в силу формулы (83.3)

$$\frac{(2l+3)\alpha_{l+1}}{(2l+1)\alpha_l} = \frac{1}{(2l+1)^2} \cdot \frac{L_{l+1} - (l+3)}{L_{l+1} + (l+1)} \cdot \frac{L_l + l}{L_l - (l+1)} x^2 \ll 1.$$

Если характер сходимости ряда (83.4) позволяет пренебречь членом с $l=2$, то, согласно равенству (83.3), это эквивалентно тому, что в амплитуде рассеяния мы пренебрегаем членами с x^6 и более высокими степенями x . В этом случае с помощью рядов (83.2б) удастся получить разложение коэффициентов α_0 и α_1 с точностью до x^4 включительно. Однако тот же самый результат можно получить значительно проще, рассмотрев непосредственно функции

$$h_0^{(1)}(x) = -ie^{ix}, \quad h_1^{(1)}(x) = -\left(1 + \frac{i}{x}\right)e^{ix} \quad (83.5a)$$

и

$$h_l^{(2)}(x) = h_l^{(1)*}(x) \text{ для действительных } x. \quad (83.5b)$$

Если вместо равенства (83.1) воспользоваться эквивалентным ему равенством (82.14) предыдущей задачи,

$$1 + \alpha_l = -\frac{L_l h_l^{(2)}(x) - x h_l^{(2)\prime}(x)}{L_l h_l^{(1)}(x) - x h_l^{(1)\prime}(x)}, \quad (83.6)$$

то для интересующих нас коэффициентов получатся следующие точные выражения:

$$1 + \alpha_0 = e^{-2ix} \frac{1 + ix/L_0}{1 - ix/L_0} \quad (83.7a)$$

и

$$1 + \alpha_1 = e^{-2ix} \frac{1 + ix - x^2/(L_1 + 1)}{1 - ix - x^2/(L_1 + 1)}. \quad (83.7b)$$

Разлагая эти выражения в ряд и ограничиваясь требуемой степенью точности, находим

$$\begin{aligned} \alpha_0 = & -2ix \left(\frac{L_0 - 1}{L_0}\right) - 2x^2 \left(\frac{L_0 - 1}{L_0}\right)^2 + \frac{4}{3} ix^3 \left[\left(\frac{L_0 - 1}{L_0}\right)^3 - \frac{1}{2L_0^3}\right] + \\ & + \frac{2}{3} x^4 \left[\left(\frac{L_0 - 1}{L_0}\right)^4 - \frac{2}{L_0^3} \left(\frac{L_0 - 1}{L_0}\right)\right] + \dots \end{aligned} \quad (83.8a)$$

и

$$\alpha_1 = -\frac{2}{3} ix^3 \frac{L_1 - 2}{L_1 + 1}. \quad (83.8b)$$

В разложении коэффициента α_1 член, пропорциональный x^4 , отсутствует. В том случае, когда член с $l=1$ начинает только-только сказываться, мы должны для получения достаточной степени точности удерживать в разложении (83.8a) три или даже четыре члена, в связи с этим часто оказывается проще вместо формулы (83.8a) пользоваться точным соотношением (83.7a).

Задача 84. Рассеяние на сферически симметричном прямоугольном потенциальном барьере

Дан потенциал $V = V_0 > 0$ при $r < R$ и $V = 0$ при $r > R$. Для случая $l=0$ найти зависимость фазы рассеяния δ_0 и парциального сечения σ_0 от энергии падающих частиц.

Решение. Вводя обозначения

$$K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \kappa = \sqrt{K_0^2 - k^2}, \quad (84.1)$$

можно записать радиальную волновую функцию $\chi_0(r)$ при $l=0$ следующим образом:

если энергия E меньше порогового значения V_0 , то

$$\chi_0(r) = \begin{cases} A \operatorname{sh} \kappa r, & r < R, \\ \sin(kr + \delta_0), & r > R, \end{cases} \quad (84.2a)$$

если же энергия E выше порогового значения V_0 , то

$$\chi_0(r) = \begin{cases} A' \sin \kappa' r, & r < R, \\ \sin(kr + \delta_0), & r > R; \end{cases} \quad (84.2б)$$

в последнем случае величина κ оказывается чисто мнимой: $\kappa = i\kappa'$. У волновой функции вне сферы нормировка во всех случаях одинакова, поэтому амплитуды A и A' характеризуют степень возбуждения области, заключенной внутри сферы. Заметим, что приведенные выше выражения уже написаны с учетом граничного условия.

Непрерывность функций χ_0 и χ_0' в точке $r = R$ предполагает непрерывность логарифмической производной, значение которой при $r = R$, т. е.

$$L_0 \equiv \frac{R\chi_0'(R)}{\chi_0(R)}, \quad (84.3)$$

можно получить двумя способами, беря для волновой функции выражения, соответственно справедливые либо в области $r < R$, либо в области $r > R$. Таким образом, имеем

$$L_0 \equiv kR \operatorname{ctg}(kR + \delta_0) = \kappa R \operatorname{cth} \kappa R, \quad E < V_0, \quad (84.4a)$$

и

$$L_0 \equiv kR \operatorname{ctg}(kR + \delta_0) = \kappa' R \operatorname{ctg} \kappa' R, \quad E > V_0. \quad (84.4б)$$

Только в случае $E > V_0$ решение во внутренней области оказывается периодическим и выражение для амплитуды A' представляет интерес:

$$A'^2 = \frac{1}{\sin^2 \kappa' R + \frac{\kappa'^2}{k^2} \cos^2 \kappa' R}. \quad (84.5)$$

Прежде всего обсудим полученные формулы для предельно низких энергий. Когда $k \rightarrow 0$, величину κ следует заменить величиной K_0 . Кроме того, чтобы величина L_0 была конечной, аргумент котангенса в правой части равенства (84.4a) должен стремиться к нулю как k . Таким образом, в этом предельном случае равенство (84.4a) принимает вид

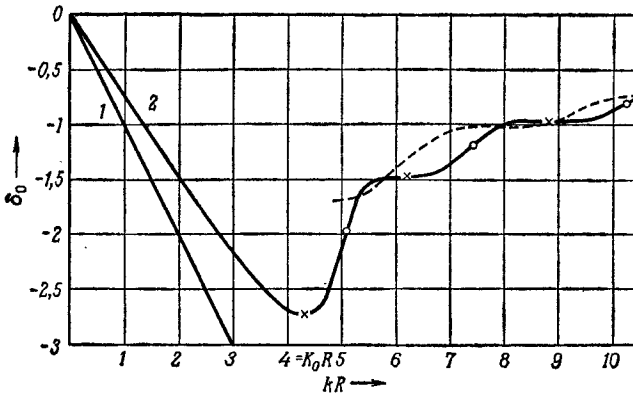
$$L_0 = \frac{kR}{kR + \delta_0} = K_0 R \operatorname{cth} K_0 R,$$

и, следовательно,

$$\delta_0 = kR \left(\frac{\operatorname{th} K_0 R}{K_0 R} - 1 \right). \quad (84.6)$$

Если высота потенциального барьера V_0 очень велика (т. е. $K_0 \rightarrow \infty$, жесткая сфера), то при всех энергиях мы можем пре-

небольшой величиной k^2 по сравнению с K_0^2 , поэтому соотношение $x = K_0$ и равенство (84.6) будут иметь место для всех энергий. Это означает, что величина фазы δ_0 растет линейно с ростом параметра kR , как показано на фиг. 43 (прямая линия 1). Кривая 2 на этой же фигуре рассчитана по формулам (84.4а) и (84.4б) для численного значения параметра $K_0R = 4$. Мы видим, что даже на начальном участке, т. е. вблизи $kR = 0$, наклон фазовой кривой для потенциального барьера конечной высоты



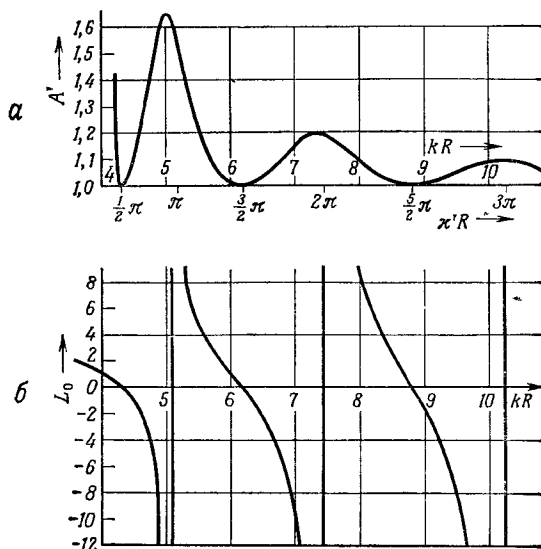
Фиг. 43. Зависимость фазы δ_0 от kR .

Прямая линия 1 соответствует случаю жесткой сферы ($K_0R = \infty$); кривая 2 построена для случая $K_0R = 4$. Пунктирная линия построена на основании первого борновского приближения. Резонансы (максимумы амплитуды) отмечены кружками, минимумы амплитуды — крестиками.

заметно отличается от наклона фазовой кривой в случае рассеяния на жесткой сфере. Это является характерной особенностью квантовой механики, согласно которой частицы могут проникать внутрь потенциальной сферы даже тогда, когда их энергия не превышает порогового значения, причем глубина проникновения зависит от высоты потенциального барьера. В классической механике, где такое проникновение попросту невозможно, высота потенциального барьера не может сказаться на рассеянии частиц, энергия которых меньше пороговой.

Если энергия E (или параметр kR), увеличиваясь, начинает превышать высоту потенциального барьера, то фазовая кривая 2 сначала достигает минимума, а затем начинает приближаться к нулю, имея при этом отчетливо выраженный ступенчатый характер. В предельном случае очень больших энергий ($kR \rightarrow \infty$), разумеется, снова $\delta_0 = 0$, так как при $E \gg V_0$ потенциальный барьер не является для частиц существенным препятствием. Причину ступенчатого характера фазовой кривой можно понять, вычислив по формуле (84.5) амплитуду A' волновой функции во

внутренней области. Для случая $K_0R = 4$ результаты этих расчетов показаны на фиг. 44, а. Мы видим, что имеются такие значения kR , т. е. такие длины волн стационарного пучка частиц, на которых происходит возбуждение колебаний внутренней части потенциальной сферы и возникают максимумы амплитуды A' . Следовательно, существуют такие полосы частот, при



Фиг. 44. а — амплитуда A' волновой функции внутри области, занятой барьером ($K_0R = 4$), в зависимости от энергии.

Кривая имеет резонансный характер.

б — логарифмическая производная волновой функции L_0 .
Сингулярности соответствуют резонансным значениям энергии.

которых колебания внутренней области попадают в резонанс с колебаниями, воздействующими на нее извне. Между каждой парой резонансов имеются минимумы амплитуды A' , где $A' = 1$; это происходит всякий раз, когда $\cos k'R = 0$ или $k'R = (n + 1/2)\pi$.

Каждому такому минимуму амплитуды соответствует нуль логарифмической производной L_0 (она показана на фиг. 44, б), поэтому при $r = R$ волновая функция имеет горизонтальную касательную и одну и ту же амплитуду внутри и вне рассеивающей сферы. Между этими значениями энергии вблизи точек $k'R = n\pi$, т. е. вблизи сингулярностей величины L_0 , располагаются резонансные энергии. В самих же этих точках волновая функция при $r = R$ обращается в нуль, но ее касательная при переходе через точку $r = R$ не меняет своего наклона, благодаря чему амплитуда во внутренней области с ее более высокими зна-

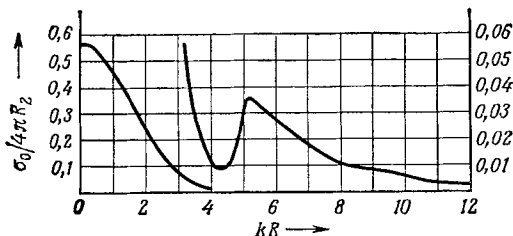
чениями длин волн достигает наибольшего возможного значения.

Далее, мы знаем общую закономерность всех резонансных явлений—при прохождении через резонанс фаза (в идеальном случае) скачком изменяется на π . Этой закономерностью и объясняется резкий рост фазы между точками, соответствующими минимумам амплитуды (на кривой 2 фиг. 43 они отмечены крестиками, а резонансы—кружками).

Зная фазовую кривую, нетрудно рассчитать зависимость парциального сечения рассеяния

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \quad (84.7)$$

от параметра kR . Результаты этих расчетов представлены на фиг. 45. В низкоэнергетическом пределе, когда $kR \rightarrow 0$, фаза



Фиг. 45. Зависимость сечения s -рассеяния σ_0 от kR (в двух различных масштабах).

Вкладом высших значений момента l можно пренебречь только при $kR \ll 1$. Резонансный максимум вблизи $kR=5$ в эксперименте будет выражен по этой причине менее отчетливо.

δ_0 , согласно равенству (84.6), становится малой величиной, так что в формуле (84.7) $\sin \delta_0$ можно заменить его аргументом:

$$\sigma_0(0) = 4\pi a_0^2, \quad a_0 = R \left(1 - \frac{\text{th} K_0 R}{K_0 R} \right). \quad (84.8)$$

Величина a_0 , определенная равенством (84.8), называется *длиной рассеяния* потенциала. Для нашего числового примера $a_0 = 0,75R$. (О роли длины рассеяния см. задачу 88.) По мере роста энергии на виде кривой сечения рассеяния начинают сказываться резонансы, но в нашем примере только первый из них, расположенный вблизи $kR=5,1$, приводит к отчетливо выраженному эффекту. Высшие резонансы почти не заметны на кривой сечения рассеяния. Экспериментальная ситуация в этом отношении еще менее благоприятна, так как здесь приходится иметь дело со все возрастающими вкладами в сечение σ от волн с $l \neq 0$. Таким образом, кривая сечения рассеяния содержит не очень много информации.

Замечание. Каким образом фаза рассеяния δ_0 стремится к нулю при очень больших энергиях, можно выяснить, воспользовавшись первым борновским приближением (см. задачу 105). При $l=0$ имеем

$$\delta_0 = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{k} \int_0^{\infty} \sin^2 kr V(r) dr,$$

откуда для частного вида потенциала, рассматривавшегося выше, получаем

$$\delta_0 = -\frac{K_0^2}{k} \int_0^R \sin^2 kr dr = -\frac{K_0^2}{4k^2} (2kR - \sin 2kR). \quad (84.9)$$

Рассчитанная по этой формуле фаза рассеяния показана на фиг. 43 пунктирной линией. Для представленной там энергетической области значения фазы рассеяния еще довольно велики, поэтому от борновского приближения не следует ожидать результатов, удовлетворительных в количественном отношении. Замечательно уже то, что даже для этих энергий борновская формула, если отвлечься от смещения резонансов, правильно передает ход фазовой кривой, включая ее ступенеобразный характер; последнее, конечно, объясняется наличием члена с синусом в формуле (84.9).

Задача 85. Аномальное рассеяние

Изменим потенциал предыдущей задачи таким образом, чтобы центр сферы был окружен потенциальной ямой:

$$\frac{2mV(r)}{\hbar^2} = \begin{cases} -K_1^2, & 0 \leq r < r_1, \\ K_0^2, & r_1 \leq r < R, \\ 0, & R \leq r. \end{cases} \quad (85.1)$$

Вычислить изменение фазы δ_0 , определенной в предыдущей задаче, и проанализировать случай $K_0 R = 4$ (прежнее значение), $K_1 r_1 = 1,5$ и $r_1 = \frac{1}{2}R$.

Решение. Рассматриваемый потенциал схематически изображен на фиг. 46. Введем обозначения

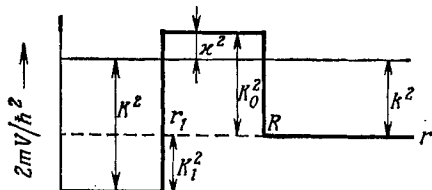
$$\kappa^2 = K_0^2 - k^2, \quad K^2 = K_1^2 + k^2, \quad (85.2)$$

смысл которых для энергий, не превышающих порогового значения ($k^2 < K_0^2$, κ — действительная величина), разъяснен на той же фигуре. В этих обозначениях радиальная волновая функция $\chi_0(r)$ записывается в виде

$$\chi_0(r) = \begin{cases} B \sin Kr, & 0 \leq r \leq r_1, \\ A (\operatorname{sh} \kappa r + \gamma \operatorname{ch} \kappa r), & r_1 \leq r \leq R, \\ \sin(kr + \delta_0), & r \geq R. \end{cases} \quad (85.3)$$

Для энергий, превышающих пороговое значение, величина κ будет чисто мнимой, $\kappa = i\kappa'$ (κ' — действительная величина),

однако формулы (85.2) и (85.3) после указанной формальной замены можно использовать и в этом случае. Рассматриваемая задача отличается от предыдущей наличием дополнительного граничного условия при $r=r_1$. Следовательно, при $r_1=0$ она точно переходит в задачу, рассмотренную ранее: формально в этом можно убедиться, положив в формуле (85.3) $\gamma=0$.



Фиг. 46. Рассеивающий потенциал задачи 85.

Теперь в нашем распоряжении имеется два условия непрерывности логарифмической производной функции (85.3): одно в точке $r=r_1$, другое в точке $r=R$. Эти условия гласят:

$$L_0(r_1) = K r_1 \operatorname{ctg} K r_1 = \kappa r_1 \frac{1 + \gamma \operatorname{th} \kappa r_1}{\operatorname{th} \kappa r_1 + \gamma}, \quad (85.4a)$$

$$L_0(R) = \kappa R \frac{1 + \gamma \operatorname{th} \kappa R}{\operatorname{th} \kappa R + \gamma} = k R \operatorname{ctg} (k R + \delta_0). \quad (85.4b)$$

Из соотношения (85.4a) мы находим величину γ ,

$$\gamma = \frac{\frac{\kappa}{K} \operatorname{tg} K r_1 - \operatorname{th} \kappa r_1}{1 - \frac{\kappa}{K} \operatorname{tg} K r_1 \operatorname{th} \kappa r_1}, \quad (85.5)$$

а затем из условия (85.4b) — величину δ_0 ,

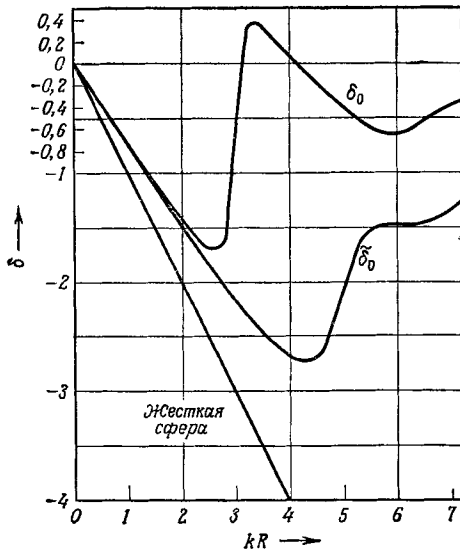
$$\delta_0 = -k R + \operatorname{arctg} \left\{ \frac{k}{\kappa} \cdot \frac{\operatorname{th} \kappa R + \gamma}{1 + \gamma \operatorname{th} \kappa R} \right\}. \quad (85.6)$$

Выражение (85.5) показывает, что при $r_1=0$, действительно, $\gamma=0$, на что мы уже обращали внимание выше. С точки зрения числовых расчетов выражение (85.5) для γ удобнее сразу же подставить в формулу (85.6). Такая подстановка после элементарных преобразований дает

$$\delta_0 = -k R + \operatorname{arctg} \left\{ \frac{k R}{\kappa R} \cdot \frac{\operatorname{th} \kappa (R - r_1) + \kappa r_1 \frac{\operatorname{tg} K r_1}{K r_1}}{1 + \kappa r_1 \frac{\operatorname{tg} K r_1}{K r_1} \operatorname{th} \kappa (R - r_1)} \right\}. \quad (85.7)$$

Зависимость фазы рассеяния δ_0 , вычисленной по формуле (85.7) для значений параметров $K_1 r_1 = 1,5$, $K_0 (R - r_1) = 2$,

$K_0 R = 4$, от kR показана на фиг. 47. Там же для сравнения изображены результаты, полученные в предыдущей задаче (кривая $\bar{\delta}_0$), и результаты для случая рассеяния на жесткой сфере радиуса R (прямая линия). Между кривыми δ_0 и $\bar{\delta}_0$ мы не видим существенного различия при энергиях, меньших $kR \approx 2$.



Фиг. 47. Зависимость фазы δ_0 от kR для случая $l=0$ при аномальном рассеянии, которое вызвано потенциальной ямой внутри рассеивающей сферы. Для сравнения приведена фаза рассеяния $\bar{\delta}_0$, в отсутствие потенциальной ямы, определенная в предыдущей задаче. Прямая линия получена для рассеяния на жесткой сфере.

Из этого можно сделать вывод, что волна не проникает глубоко внутрь рассеивающей сферы и поэтому потенциальная яма, окружающая ее центр, не оказывает заметного влияния на характер рассеяния. Однако положение дел в корне меняется в интервале энергий $3 < kR < 6$, где поведение фазовых кривых носит существенно различный характер. Резкий подъем кривой δ_0 в окрестности точки $kR = 3$ указывает на наличие резонанса при этой энергии.

Следующие рассуждения позволяют понять причину аномального поведения фазовой кривой δ_0 . Предположим, что значение R бесконечно велико. В этом случае мы имели бы дело просто с потенциальной ямой глубиной

$$\tilde{K}^2 = K_1^2 + K_0^2,$$

в которой были бы принадлежащие связанным состояниям энер-

гетические уровни, определяемые уравнением

$$\operatorname{tg} Kr_1 = -\frac{K}{\sqrt{\bar{K}^2 - K^2}}.$$

В рассматриваемом числовом примере этому уравнению удовлетворяет значение $Kr_1 = 2,125$, которому, если вернуться к первоначальной величине R , будет соответствовать значение $kR = 3,14$, т. е. как раз точка фазовой кривой на фиг. 47, указывающая на наличие резонансного уровня.

Задача 86. Рассеяние на резонансных уровнях

Сферическая полость радиуса R окружена тонкой потенциальной стенкой, непроницаемость которой характеризуется безразмерным коэффициентом Ω , так что потенциал имеет вид

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Omega}{R} \delta(r - R). \quad (86.1)$$

Исследовать рассеяние парциальной волны с $l = 0$.

Замечание. Эта задача тесно связана с одномерным случаем, рассмотренным нами в задаче 27. Однако определение коэффициента непроницаемости здесь отличается от определения, данного в задаче 20 и использованного в задаче 27, наличием множителя $2R$ в знаменателе формулы (86.1). Дело в том, что в одномерном случае в нашем распоряжении не было характерного параметра, имеющего размерность длины, который был бы подобен радиусу сферической полости настоящей задачи. Заметьте, кстати, что одномерная δ -функция имеет размерность обратной длины.

Решение. Уравнение Шредингера для радиальной волновой функции $\chi_0(r)$ в случае потенциала (86.1) имеет вид

$$\chi_0'' + \left[k^2 - \frac{\Omega}{R} \delta(r - R) \right] \chi_0 = 0. \quad (86.2)$$

Сама функция χ_0 должна быть непрерывной в точке, где у потенциала имеется сингулярность, ее же производная χ_0' в этой точке претерпевает разрыв, что можно установить, проинтегрировав уравнение (86.2) вблизи поверхности потенциальной стенки. Это интегрирование дает

$$\int_{R-\varepsilon}^{R+\varepsilon} \chi_0'' dr = \chi_0'(R + \varepsilon) - \chi_0'(R - \varepsilon) = \frac{\Omega}{R} \chi_0(R),$$

так что для логарифмической производной

$$L_0(r) = r \frac{\chi_0'(r)}{\chi_0(r)} \quad (86.3)$$

в результате получаются граничные условия

$$L_0(R + \varepsilon) - L_0(R - \varepsilon) = \Omega. \quad (86.4)$$

С помощью соотношения (86.4) теперь можно связать выражения для волновой функции внутри сферической полости:

$$\chi_0(r) = A \sin kr, \quad r < R, \quad (86.5a)$$

и вне ее

$$\chi_0(r) = \sin(kr + \delta_0), \quad r > R. \quad (86.5b)$$

В результате имеем

$$k[\operatorname{ctg}(kR + \delta_0) - \operatorname{ctg} kR] = \Omega. \quad (86.6)$$

Последнее уравнение можно переписать в виде, более удобном для определения фазы:

$$\operatorname{tg}(x + \delta_0) = \frac{\operatorname{tg} x}{1 + \Omega \frac{\operatorname{tg} x}{x}}, \quad \text{где } x = kR. \quad (86.7)$$

Амплитуда A , фигурирующая в выражении (86.5a), легко находится с помощью условия непрерывности функции $\chi_0(r)$:

$$A = \frac{\sin(x + \delta_0)}{\sin x}.$$

Исключая отсюда с помощью уравнения (86.7) фазу δ_0 , получаем

$$A^2 = \frac{\operatorname{tg}^2 x + 1}{\operatorname{tg}^2 x + \left(1 + \Omega \frac{\operatorname{tg} x}{x}\right)^2}. \quad (86.8)$$

Как нетрудно убедиться, для непроницаемой потенциальной стенки ($\Omega \rightarrow \infty$) из уравнения (86.7) следует результат, соответствующий предельному случаю рассеяния на жесткой сфере:

$$\operatorname{tg}(x + \delta_0) = 0, \quad \text{или } \delta_0 = -x. \quad (86.9)$$

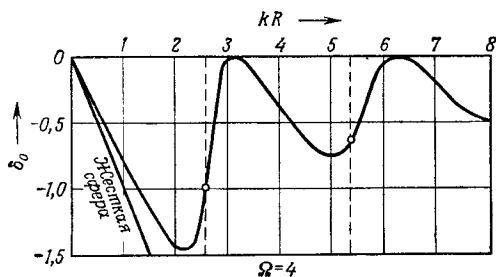
В этом случае амплитуда A , согласно формуле (86.8), обращается в нуль.

При конечных, но достаточно больших значениях Ω , вблизи нулей знаменателя дроби, стоящей справа в уравнении (86.7), имеются такие узкие полосы значений энергии, для которых в характере рассеяния наблюдаются существенные отличия от рассеяния на жесткой сфере. Это те же самые узкие энергетические полосы, для которых, как показывает формула (86.8), амплитуда A внутри полости становится большой. Таким образом, налицо типичное явление резонанса, когда для узких энергетических полос имеется сильная связь между колебаниями внутри и вне полости, а для всех прочих энергий такая связь почти полностью отсутствует. Чем более проницаема потенциальная стенка, тем менее отчетливо выражено явление резонанса.

Если $\Omega \gg 1$, то резонансы имеют место вблизи точек $x = n\pi$. Но это соответствует как раз тем энергиям, для которых $\chi_0(R) = 0$, другими словами, это собственные уровни полости

в том случае, когда она окружена непроницаемой потенциальной стенкой. Таким образом, резонансные уровни, отвечающие максимальной связи, совпадают или весьма близки к собственным энергетическим уровням полости.

Ниже обсуждаются результаты числовых расчетов для случаев $\Omega = 4$ и $\Omega = 10$. Для меньшего значения, $\Omega = 4$, зависимость фазы рассеяния от x показана на фиг. 48. При малых энергиях наша кривая не очень отличается от прямой, соответствующей рассеянию на жесткой сфере, однако тангенс угла наклона начального участка нашей кривой равен $-\Omega/(1 + \Omega) = -0,8$ вместо -1 в случае жесткой сферы. Первые два нуля знаменателя дроби в (86.7) расположены соответственно при $x_1 = 2,57$ и

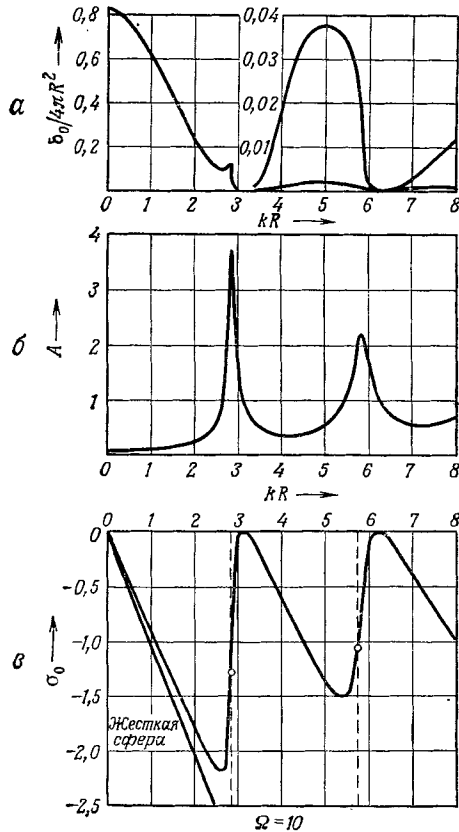


Фиг. 48. Зависимость фазы рассеяния δ_0 от kR для сферической полости с $\Omega = 4$.

При больших значениях Ω резонансы выражены отчетливее (см. фиг. 49, а).

$x_2 = 5,35$ (на фигуре их положение отмечено вертикальными пунктирными линиями). Эти резонансные энергии лежат заметно левее точек $x = n\pi$, в которых фаза рассеяния вновь обращается в нуль. При больших значениях Ω резонансные энергии располагаются ближе к точкам $x = n\pi$, так, например, для значения $\Omega = 10$ первый резонанс сдвигается в точку $x_1 = 2,86$, а второй — в точку $x_2 = 5,76$ (см. фиг. 49, в). Подъем фазовой кривой становится при этом круче, и резонанс выражен более отчетливо. В пределе $\Omega \rightarrow \infty$ мы имеем в точках $x_n = n\pi$ скачки фазы $\Delta\delta_0 = \pi$. Разумеется, это не противоречит линейному закону (86.9) для случая жесткой сферы, так как к фазе δ_0 всегда можно добавить целое кратное π .

Проанализируем явление резонанса в случае $\Omega = 10$ более подробно. На фиг. 49, б изображена амплитуда A , рассчитанная по формуле (86.8). Мы видим, что у амплитудной кривой имеется два отчетливо выраженных резонансных максимума, лежащих в тех же точках x , которые отмечены на фазовой диаграмме (фиг. 49, в) вертикальными пунктирными линиями. Из фиг. 49, а видно, что сечение рассеяния, по крайней мере для первого из



Ф и г. 49. *a* — сечение рассеяния при $l=0$ (на фигуре использованы два различных масштаба).

Несмотря на пренебрежение высшими моментами количества движения, на кривой сечения рассеяния даже для отчетливо выраженного резонанса при $kR=2,86$ имеется всего лишь довольно незначительный пик.

b — резонансы на амплитудной кривой.

в — та же фаза рассеяния δ_0 , что и на фиг. 48, но для случая $\Omega = 10$

этих значений x , имеет небольшой, но не очень отчетливо выраженный резонансный пик. По обе стороны от каждого резонанса имеются две точки, для которых $A=1$ и, следовательно,

$$1 + \Omega \frac{\operatorname{tg} x}{x} = \pm 1. \tag{86.10}$$

Верхнему знаку отвечают точки $x = n\pi$, где $\delta_0 = 0$ и $\sigma_0 = 0$. Последний результат совсем нетрудно понять, если заметить, что в этом случае волновые функции внутри и вне полости тождественно совпадают и поэтому не возникает никакой рассеянной

волны вообще. Нижнему знаку в формуле (86.10) отвечают точки, расположенные вблизи минимумов фазы рассеяния. Из соотношения

$$\frac{d\delta_0}{dx} = 0$$

легче получить, что фаза рассеяния стационарна в точках

$$\frac{\operatorname{tg} x}{x} = -\frac{2}{\Omega - 1}.$$

Для случая $\Omega = 10$ мы находим $x = 2,616$ и $x = 5,406$, в то время как формула (86.10) при выборе нижнего знака дает

$$\frac{\operatorname{tg} x}{x} = -\frac{2}{\Omega},$$

что при том же значении Ω приводит к значениям $x = 2,654$ и $x = 5,454$, располагающимся очень близко к точкам минимумов фазовой кривой.

Кривая сечения рассеяния содержит довольно скудную информацию (см. фиг. 49,а). Первый резонанс приводит лишь к небольшому пику. На кривой не заметно никаких следов второго резонанса, если не считать двух нулей, расположенных много правее и много левее от него. Наличие этих нулей говорит лишь о том, что где-то между ними имеется резонанс неизвестной высоты и ширины. Еще меньше сведений мы можем получить из экспериментальной кривой сечения рассеяния, так как возрастающий с ростом x вклад состояний с высшими значениями момента может замаскировать наличие нулей на кривой сечения σ_0 .

Задача 87. Вклад состояний с высшими значениями момента количества движения

Для потенциала, рассмотренного в предыдущей задаче, вычислить фазы рассеяния и парциальные сечения рассеяния вплоть до значений $l = 2$.

Решение. При любом значении l радиальную волновую функцию можно записать в виде

$$\chi_l(r) = A_l j_l(kr) \quad \text{для } r < R, \quad (87.1a)$$

$$\chi_l(r) = j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l \quad \text{для } r > R. \quad (87.1б)$$

Так как при $kr \gg l$ сферические цилиндрические функции имеют асимптотику

$$j_l(kr) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad n_l(kr) \rightarrow -\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right),$$

то выражение (87.1б) приводит к следующей асимптотической

формуле для функции χ_l :

$$\chi_l \rightarrow \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right). \quad (87.2)$$

Следовательно, δ_l есть фаза рассеяния l -й парциальной волны, а соответствующее парциальное сечение

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \sin^2 \delta_l. \quad (87.3)$$

Для определения фазы рассеяния δ_l мы снова воспользуемся граничными условиями в точке $r=R$, где функция χ_l должна быть непрерывна, а ее логарифмическая производная, $r\chi'_l(r)/\chi_l(r)$, имеет скачок, равный по величине Ω . Таким образом, имеем

$$A_l j_l(x) = j_l(x) \cos \delta_l - n_l(x) \sin \delta_l, \quad (87.4)$$

$$x \left\{ \frac{j'_l(x) - \operatorname{tg} \delta_l n'_l(x)}{j_l(x) - \operatorname{tg} \delta_l n_l(x)} - \frac{j'_l(x)}{j_l(x)} \right\} = \Omega. \quad (87.5)$$

Здесь $x = kR$, а штрих означает производную по аргументу kr .

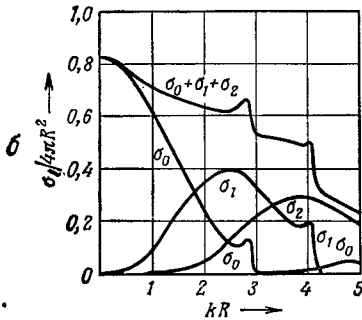
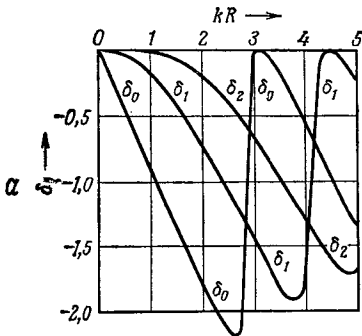
Уравнение (87.5) позволяет получить для фазы рассеяния δ_l выражение вида

$$\operatorname{tg} \delta_l = \frac{j_l^2(x)}{j_l(x) n_l(x) - \frac{x}{\Omega}}, \quad (87.6)$$

которое можно подставить в соотношение (87.4) с тем, чтобы найти явное выражение для амплитуды A_l .

При $l=0$ сферические цилиндрические функции сводятся соответственно к $j_0(x) = \sin x$ и $n_0(x) = -\cos x$, а формулы (87.4) и (87.6) точно переходят в формулы предыдущей задачи.

На фиг. 50, *a* показаны фазовые кривые, соответствующие



Фиг. 50. Фаза рассеяния (*a*) и сечение рассеяния (*b*) в случае сферической полости с учетом вклада высших моментов.

Пик при $kR=2,86$ еще можно заметить.

значениям $l=0, 1, 2$. Расчеты проводились для случая $\Omega=10$, а значения x брались в интервале $0 \leq x \leq 5$. Все фазовые кривые зависят от x аналогичным образом, и основное различие между ними состоит в том, что при малых x по мере роста l они все медленнее удаляются от прямой $\delta=0$. При низких энергиях

вклад дают только центральные столкновения с $l=0$. Начиная со значений $x=1$ и выше становится существенным вклад волны с $l=1$, а со значений $x=2$ — и волны с $l=2$. На кривых парциальных сечений для $l=0$ и $l=1$ заметны небольшие резонансные пики (фиг. 50, б), однако на плавно меняющейся суммарной кривой $\sigma = \sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2$ они проявляются лишь в виде небольших возвышений. (Резкий спад этой кривой справа от точки $x=4$ обманчив: на самом деле здесь уже велик вклад от неучетной нами волны с $l=3$.)

Задача 88. Приближение, не зависящее от формы потенциала

Показать, что при низких энергиях имеет место разложение в ряд по степеням k^2 , начало которого имеет вид

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2,$$

где длина рассеяния a и эффективный радиус r_0 — единственные параметры, зависящие от потенциала.

Из существования подобного разложения следует, что в области энергий, достаточно низких, чтобы можно было ограничиться двумя первыми членами (т. е. там, где еще не наблюдаются эффекты, связанные с $l=1$), любая экспериментальная кривая $\sigma(E)$ содержит информацию, достаточную лишь для определения двух констант. Это означает, что таким путем нельзя определить форму потенциала. Последнее обстоятельство особенно важно в ядерной физике низких энергий, где оно является одной из причин нашего незнания количественных законов для ядерных сил.

Решение. В этой низкоэнергетической области мы будем иметь дело только со случаем $l=0$. Обозначим посредством $\chi_k(r)$ радиальную волновую функцию состояния с энергией $\hbar^2 k^2/2m$, а посредством $\chi_0(r)$ — волновую функцию состояния с нулевой энергией. Эти две функции подчиняются дифференциальным уравнениям

$$\chi_0'' - U(r) \chi_0 = 0 \quad (88.1a)$$

и

$$\chi_k'' + [k^2 - U(r)] \chi_k = 0, \quad (88.1b)$$

где

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r),$$

а также граничным условиям

$$\chi_0(0) = 0, \quad \chi_k(0) = 0. \quad (88.2)$$

Поведение этих функций в области $r > R_0$, где потенциал считается равным нулю, определяется формулами

$$\chi_0 = C(r-a), \quad \chi_k = \sin(kr + \delta_0), \quad (88.3)$$

причем постоянная a может быть любого знака.

Умножая уравнение (88.1a) на χ_k , а уравнение (88.1б) на χ_0 и вычитая одно из другого, получаем

$$\chi_k \chi_0'' - \chi_0 \chi_k'' = k^2 \chi_0 \chi_k.$$

Проинтегрируем это уравнение от 0 до r и воспользуемся условиями (88.2):

$$\chi_k(r) \chi_0'(r) - \chi_0(r) \chi_k'(r) = k^2 \int_0^r \chi_0 \chi_k dr,$$

или

$$\frac{\chi_0'}{\chi_0} - \frac{\chi_k'}{\chi_k} = k^2 \frac{\int_0^r \chi_0 \chi_k dr}{\chi_0(r) \chi_k(r)}.$$

Если в качестве верхнего предела интегрирования взять какое-либо значение радиуса $R > R_0$, то в левой части последнего равенства мы сможем воспользоваться выражениями (88.3) и в результате получим

$$\frac{1}{R-a} - k \operatorname{ctg}(kR + \delta_0) = k^2 \frac{\int_0^R \chi_0(r) \chi_k(r) dr}{\chi_0(R) \chi_k(R)}. \quad (88.4)$$

Теперь мы можем заменить здесь котангенс суммы по формуле

$$\operatorname{ctg}(kR + \delta_0) = \frac{\operatorname{ctg} \delta_0 - \operatorname{tg} kR}{1 + \operatorname{ctg} \delta_0 \operatorname{tg} kR}.$$

В результате уравнение (88.4) превратится в линейное уравнение относительно $\operatorname{ctg} \delta_0$, и его решение будет иметь вид

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = \frac{Q + k \operatorname{tg} kR}{1 - Q \frac{\operatorname{tg} kR}{k}}, \quad (88.5)$$

где

$$Q = \frac{1}{R-a} - k^2 \frac{\int_0^R \chi_0(r) \chi_k(r) dr}{\chi_0(R) \chi_k(R)}. \quad (88.6)$$

До сих пор мы не делали никаких приближений.

Разложим теперь наши выражения в ряды по степеням k^2 . Для этого сначала заменим тангенс его разложением:

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = \frac{Q + k^2 R + \dots}{1 - QR - \frac{1}{3} Q k^2 R^3 + \dots},$$

а затем заменим величину Q , определяемую формулой (88.6), более простым выражением:

$$Q = \frac{1}{R-a} - k^2 \mathcal{X}, \quad (88.7)$$

где

$$\mathcal{K}^e = \frac{\int_0^R \chi_0^2(r) dr}{\chi_0^2(R)}. \quad (88.8)$$

В результате этих преобразований в числителе и знаменателе дроби (88.5) получаются выражения, верные с точностью до членов k^2 включительно, так что после соответствующей перегруппировки мы приходим к формуле искомого вида:

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2, \quad (88.9)$$

где эффективный радиус определяется соотношением

$$\frac{1}{2} r_0 = \frac{(R-a)^2 + a^2}{3a^2} - \mathcal{K}^e \left(\frac{R-a}{a} \right)^2. \quad (88.10)$$

Нам осталось разобраться в двух вопросах.

1. Величина R , удовлетворяющая неравенству $R > R_0$, в остальном совершенно произвольна, поэтому необходимо убедиться, что эффективный радиус (88.10) от нее не зависит.

2. Если величина r_0 действительно имеет смысл эффективного радиуса, то следует проверить, всегда ли эта постоянная должна быть положительной.

В первый вопрос легко внести ясность, рассмотрев изменение выражения (88.10) при переходе от R к $R + dR$. Мы имеем

$$\frac{d}{dR} \left(\frac{1}{2} r_0 \right) = \left(\frac{R-a}{a} \right)^2 - \frac{d\mathcal{K}^e}{dR} \left(\frac{R-a}{a} \right)^2 - 2\mathcal{K}^e \frac{R-a}{a^2}. \quad (88.11)$$

Из определения (88.8) следует

$$\mathcal{K}^e(R + dR) = \frac{\mathcal{K}^e(R) \chi_0^2(R) + \chi_0^2(R) dR}{\chi_0^2(R) + 2\chi_0(R) \chi_0'(R) dR} = \frac{\mathcal{K}^e(R) + dR}{1 + \frac{2dR}{R-a}},$$

или

$$\frac{d\mathcal{K}^e}{dR} = 1 - \frac{2\mathcal{K}^e}{R-a}, \quad (88.12)$$

поэтому, подставляя (88.12) в уравнение (88.11), сразу же получаем

$$\frac{d}{dR} \left(\frac{1}{2} r_0 \right) = 0,$$

каково бы ни было значение R , лишь бы оно превосходило R_0 . Следовательно, постоянная r_0 не зависит от выбора R .

Чтобы ответить на второй вопрос, предположим, что $R > |a|$, тогда первый член в правой части (88.10) будет положительным, второй же член в силу неравенства $\mathcal{K}^e > 0$ — отрицательным. Таким образом, эффективный радиус будет положительной величиной, если первый член рассматриваемого выражения больше

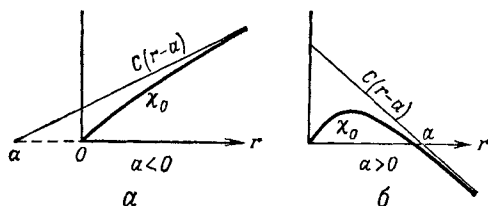
второго, т. е.

$$\mathcal{K}^0 < \frac{(R-a)^3 + a^3}{3(R-a)^2}.$$

Это неравенство эквивалентно условию

$$\int_0^R \chi_0^2(r) dr < \int_0^R [C(r-a)]^2 dr = \frac{1}{3} C^2 \{(R-a)^3 + a^3\},$$

в чем нетрудно убедиться с помощью определения (88.8). В случае $a < 0$ (фиг. 51, а) справедливость нашего неравенства следует



Фиг. 51. Волновая функция $\chi_0(r)$ состояния с нулевой энергией и ее асимптотическое поведение при различных знаках длины рассеяния a .

а) $a < 0$; б) $a > 0$.

из того, что график функции χ_0 всюду располагается под прямой $C(r-a)$. Оно справедливо и в случае $a > 0$ (фиг. 51, б), если только точка $r = a$ расположена не слишком далеко от нуля функции $\chi_0(r)$.

Замечание. С помощью равенства

$$\int_0^R [C(r-a)]^2 dr = \frac{1}{3} C^2 \{(R-a)^3 + a^3\}$$

формулу для эффективного радиуса (88.10) можно привести к виду

$$\frac{1}{2} r_0 = \int_0^R \left\{ \left(1 - \frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{a^2 C^2} \chi_0^2(r) \right\} dr.$$

Обычно в литературе используют такую нормировку, при которой асимптотически $\chi_0 \rightarrow 1 - r/a$ и, следовательно, $C = -1/a$. Кроме того, в рассмотрение вводят разность этой асимптотики и функции χ_0

$$\varphi(r) = 1 - \frac{r}{a} - \chi_0(r),$$

что позволяет записать формулу для эффективного радиуса в виде

$$\frac{1}{2} r_0 = \int_0^{\infty} \varphi(r) \left[2 \left(1 - \frac{r}{a}\right) - \varphi(r) \right] dr.$$

В качестве верхнего предела интегрирования здесь взята бесконечность, но функция $\varphi(r)$, конечно, равна нулю правее точки $r=R_0$.

Задача 89. Низкоэнергетическое рассеяние на сферически симметричной прямоугольной яме

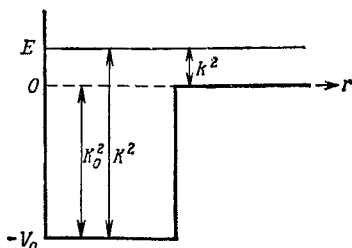
Исследовать низкоэнергетическое разложение

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 \quad (89.1)$$

в случае сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямы радиуса R и глубины $V_0 = \hbar^2 K_0^2 / 2m$ (фиг. 52):

а) получить формулу (89.1) непосредственно из граничных условий при $r=R$;

б) использовать общую формулу для r_0 , полученную в предыдущей задаче, применительно к потенциалу рассматриваемого частного вида.



Фиг. 52. Потенциальная яма с обозначениями, используемыми в тексте.

Общий множитель $2m/\hbar^2$ не указан.

Решение. Для заданного потенциала имеем, если $r < R$,

$$\chi_k = A_k \sin Kr, \quad \chi_0 = A_0 \sin K_0 r, \quad (89.2)$$

и, если $r > R$,

$$\chi_k = \sin(kr + \delta_0), \quad \chi_0 = C(r - a). \quad (89.3)$$

Логарифмическая производная L_0 волновой функции состояния с нулевой энергией в точке $r=R$ будет равна

$$L_0 = \frac{R \chi'_0(R)}{\chi_0(R)} = K_0 R \operatorname{ctg} K_0 R = \frac{R}{R-a}. \quad (89.4)$$

а. Запишем логарифмическую производную функции χ_k в точке $r=R$:

$$L_k = KR \operatorname{ctg} KR = kR \operatorname{ctg}(kR + \delta_0). \quad (89.5)$$

Так как

$$\operatorname{ctg}(kR + \delta_0) = \frac{\operatorname{ctg} \delta_0 - \operatorname{tg} kR}{1 + \operatorname{ctg} \delta_0 \operatorname{tg} kR},$$

то, решая это уравнение относительно $\operatorname{ctg} \delta_0$, получаем

$$\operatorname{ctg} \delta_0 = \frac{L_k + kR \operatorname{tg} kR}{kR - L_k \operatorname{tg} kR}. \quad (89.6)$$

Разложение в ряд по степеням k проще всего сделать в два этапа. Сначала, воспользовавшись тем, что $kR \ll 1$, разложим

$\operatorname{tg} kR$. В результате находим

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = \frac{L_k}{R(1-L_k)} + k^2 R \left[\frac{1}{1-L_k} + \frac{L_k^2}{3(1-L_k)^2} \right]. \quad (89.7)$$

Следует заметить, что равенства (89.6) и (89.7) выполняются для любого потенциала, лишь бы он обращался в нуль при $r \geq R$. Специальным видом нашего потенциала мы воспользуемся на втором этапе при разложении логарифмической производной L_k в ряд. Введем обозначения:

$$X_0 = K_0 R, \quad X = KR, \quad x = kR. \quad (89.8)$$

Тогда первое равенство (89.5) примет вид

$$L_k = X \operatorname{ctg} X,$$

где

$$X = \sqrt{X_0^2 + x^2} = X_0 + \frac{x^2}{2X_0} + \dots \quad (89.9)$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} L_k &= L_0 \left\{ 1 + \frac{x^2}{2X_0} \left(\frac{1}{X_0} - \operatorname{ctg} X_0 - \operatorname{tg} X_0 \right) \right\} = \\ &= L_0 \left\{ 1 + \frac{x^2}{2X_0^2} \left(1 - L_0 - \frac{X_0^2}{L_0} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Отсюда получаем

$$\frac{L_k}{R(1-L_k)} = \frac{L_0}{R(1-L_0)} \left\{ 1 + \frac{x^2}{2X_0^2} \left(1 - \frac{X_0^2}{L_0(1-L_0)} \right) \right\},$$

поэтому первое слагаемое в формуле (89.7) можно разбить на два члена: один из них дает вклад в длину рассеяния,

$$-\frac{1}{a} = \frac{L_0}{R(1-L_0)}, \quad (89.10)$$

а другой, пропорциональный k^2 , — в эффективный радиус. Во втором слагаемом в формуле (89.7) в нашем приближении мы можем заменить L_k на L_0 и в результате получим

$$\frac{1}{2} r_0 = \frac{R}{2X_0^2} \cdot \frac{L_0}{1-L_0} \left(1 - \frac{X_0^2}{L_0(1-L_0)} \right) + R \left(\frac{1}{1-L_0} + \frac{L_0^2}{3(1-L_0)^2} \right).$$

Выразим в последней формуле логарифмическую производную L_0 через безразмерную величину

$$\alpha = \frac{a}{R}. \quad (89.11)$$

Учитывая теперь, что

$$L_0 = \frac{1}{1-\alpha}, \quad \frac{L_0}{1-L_0} = -\frac{1}{\alpha}, \quad \frac{1}{1-L_0} = -\frac{1-\alpha}{\alpha}, \quad (89.12)$$

и приводя подобные члены, получаем

$$\frac{1}{2} r_0 = R \left\{ -\frac{1}{2X_0^2 \alpha} + \frac{1}{2} - \frac{1}{6\alpha^2} \right\}. \quad (89.13)$$

Теперь нам осталось с помощью равенства (89.4) записать окончательное выражение для длины рассеяния. Оно имеет вид

$$a = R \left(1 - \frac{\operatorname{tg} X_0}{X_0} \right). \quad (89.14)$$

Формулы (89.13) и (89.14) совместно с равенством (89.1) дают полное решение нашей задачи.

б. Общий метод предыдущей задачи не дает никакого иного пути определения длины рассеяния, кроме пути, основанного на использовании равенства (89.4), что приводит непосредственно к формуле (89.14). Однако для вычисления эффективного радиуса уже нет необходимости вводить χ_k или L_k , если мы с самого начала пользуемся общим выражением (88.10), которое в обозначениях (89.11) принимает вид

$$\frac{1}{2} r_0 = R \left\{ \frac{(1-\alpha)^3 + \alpha^3}{3\alpha^2} - \mathcal{K}^e \frac{(1-\alpha)^2}{\alpha^2} \right\}, \quad (89.15)$$

где

$$\mathcal{K}^e = \frac{\int_0^R \chi_0^2(r) dr}{\chi_0^2(R)}.$$

Постоянная \mathcal{K}^e получается элементарным интегрированием, если учесть, что функция $\chi_0(r)$ в нашем случае определяется равенством (89.2). Мы имеем

$$\mathcal{K}^e = \frac{R}{2X_0 \sin^2 X_0} (X_0 - \sin X_0 \cos X_0) = \frac{R}{2} \left(1 - \frac{\operatorname{ctg} X_0}{X_0} + \operatorname{ctg}^2 X_0 \right),$$

и так как

$$\operatorname{tg} X_0 = X_0 (1 - \alpha),$$

то выражение для \mathcal{K}^e можно преобразовать к виду

$$\mathcal{K}^e = \frac{1}{2} R \left(1 + \frac{\alpha}{X_0^2 (1-\alpha)^2} \right). \quad (89.16)$$

Подставляя выражение (89.16) в (89.15), легко получаем для эффективного радиуса формулу (89.13).

Задача 90. Низкоэнергетическое рассеяние и связанные состояния

Исследовать поведение функции $\operatorname{ctg} \delta_0$ в окрестности точки $k=0$ на комплексной плоскости k . Рассмотреть вопрос о существовании связанного состояния ($k^2 < 0$) в той области значений k , где еще можно пользоваться разложением для $\operatorname{ctg} \delta_0$.

Решение. Если для малых значений k существует разложение вида

$$k \operatorname{ctg} \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 + \dots, \quad (90.1)$$

то $\text{ctg } \delta_0$ будет аналитической функцией комплексной переменной k с полюсом в точке $k=0$. Связанным состояниям отвечают значения переменной k , лежащие на положительной мнимой полуоси. Положим

$$k = i\kappa, \quad (90.2)$$

где κ —действительная и положительная величина. Подставляя выражение для k в формулу (90.1), получаем

$$\text{ctg } \delta_0 = i \left(\frac{1}{\kappa a} + \frac{1}{2} \kappa r_0 \right), \quad (90.3)$$

т. е. $\text{ctg } \delta_0$ на мнимой оси становится чисто мнимой величиной. Мы знаем, что фаза рассеяния δ_0 играет важную физическую роль по той причине, что асимптотика радиальной волновой функции s -состояния имеет вид

$$\chi_0 \rightarrow C \sin(\kappa r + \delta_0).$$

Основываясь на аналитичности функции χ_0 , мы можем для отрицательных энергий с учетом соотношения (90.3) написать

$$\chi_0 \rightarrow \frac{C}{2i} (e^{i\delta_0} e^{-\kappa r} - e^{-i\delta_0} e^{\kappa r}).$$

Функция с таким поведением будет волновой функцией связанного состояния только в том случае, если при $\kappa > 0$ будет выполняться равенство

$$e^{-i\delta_0} = 0, \quad (90.4)$$

так как только при таком условии функция χ_0 будет нормируема. Условие (90.4) можно записать по-иному:

$$\cos \delta_0 - i \sin \delta_0 = 0,$$

или

$$\text{ctg } \delta_0 = i. \quad (90.5)$$

Подставляя равенство (90.5) в формулу (90.3), получаем

$$1 = \frac{1}{\kappa a} + \frac{1}{2} \kappa r_0; \quad (90.6)$$

это соотношение связывает характеристическую величину κ с параметрами рассеяния a и r_0 . Этой связью можно воспользоваться двояким образом.

1. *Определение энергии связи из данных по рассеянию.* Предположим, что в соотношении (90.6) второе слагаемое в правой части играет роль малой поправки. В этом случае соотношение (90.6), рассматриваемое в качестве уравнения относительно κ , имеет решение

$$\kappa a = 1 + \frac{1}{2} \frac{r_0}{a}, \quad (90.7)$$

поэтому энергия связанного состояния будет равна

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(1 + \frac{r_0}{a}\right). \quad (90.8)$$

Так как здесь фигурирует только κ^2 , то необходимо подчеркнуть, что, согласно равенству (90.7), связанное состояние в рамках нашего приближения может существовать только при *положительных* длинах рассеяния.

2. *Определение сечения рассеяния по энергии связи.* Данная задача не допускает столь полного решения, так как при этом требуется найти значение двух параметров, а в нашем распоряжении имеется лишь один (энергия связи). Запишем выражение для сечения рассеяния

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \cdot \frac{1}{1 + \operatorname{ctg}^2 \delta_0} \quad (90.9)$$

и в том же приближении, в котором получено равенство (90.7), разрешим уравнение (90.6) относительно a :

$$a = \frac{1}{\kappa} + \frac{1}{2} r_0.$$

Далее из формулы (90.1) следует

$$\operatorname{ctg}^2 \delta_0 = \left(-\frac{1}{ka} + \frac{1}{2} kr_0\right)^2 \approx \frac{1}{k^2 a^2} - \frac{r_0}{a} \approx \frac{\kappa^2}{k^2} (1 - \kappa r_0) - \kappa r_0,$$

и поэтому

$$1 + \operatorname{ctg}^2 \delta_0 = \left(1 + \frac{\kappa^2}{k^2}\right) (1 - \kappa r_0).$$

Таким образом, мы приходим к знаменитой формуле Бете—Пайерлса из ядерной физики:

$$\sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2 + \kappa^2} (1 + \kappa r_0). \quad (90.10)$$

Она справедлива при малых энергиях и условии $\kappa r_0 \ll 1$.

Литература

Bethe H. A., Peierls R., Proc. Roy. Soc., A148, 146 (1935).

Задача 91. Дейтронный потенциал с жесткой сердцевиной и без нее

Используя условие существования связанного состояния $\operatorname{ctg} \delta_0 = i$, так подобрать глубину сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямы радиуса R (фиг. 53), чтобы у дейтрона было одно связанное состояние с энергией $E_D = -2,23$ МэВ. Радиус ямы взять равным $R = 1,2$ ферми (1 ферми $= 10^{-13}$ см). Чему будет равна глубина потенциальной ямы, если вблизи центра имеется жесткая сердцевина радиуса $a = 0,2$ ферми?

Решение. При *положительных* энергиях волновая функция, s -состояния, удовлетворяющая граничному условию $\chi_0(a) = 0$, имеет вид

$$\begin{aligned}\chi_0 &= C \sin K(r-a), & a < r \leq R, \\ \chi_0 &= \sin(kr + \delta_0), & R < r;\end{aligned}$$

требование непрерывности логарифмической производной в точке $r = R$ дает

$$X \operatorname{ctg} \beta X = x \operatorname{ctg}(x + \delta_0), \quad (91.1)$$

где

$$\begin{aligned}x &= kR, \\ X &= KR = \sqrt{X_0^2 + x^2}, \\ X_0 &= K_0 R, \\ \beta &= \frac{R-a}{R}.\end{aligned} \quad (91.2)$$

Фиг. 53. Дейтронный модельный потенциал с жесткой сердцевиной и без нее.

Вырезая жесткую сердцевину, мы должны сделать яму глубже, если намерены сохранить энергию связи неизменной.

Для связанного состояния с *отрицательной* энергией следует положить

$$k = i\kappa, \quad x = i\xi, \quad \xi = \kappa R, \quad (91.3)$$

тогда энергия будет равна

$$E_D = -\frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \xi^2, \quad (91.4)$$

где m^* — приведенная масса пары нуклонов ($m^* = m/2$, см. задачу 150). Вместо энергии E_D можно ввести характеристическую длину

$$l = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2m^* |E_D|}} = 4,312 \text{ ферми}, \quad (91.5a)$$

и отсюда

$$\xi = \frac{R}{l} = 0,2783. \quad (91.5b)$$

В задаче 90 мы показали, что для существования связанного состояния должно выполняться условие

$$e^{-i\delta_0} = 0, \quad \text{или} \quad \operatorname{ctg} \delta_0 = i,$$

то тогда, как очевидно, должно выполняться и условие

$$e^{-i(x+\delta_0)} = 0, \quad \text{или} \quad \operatorname{ctg}(x+\delta_0) = i,$$

поэтому равенство (91.1) дает

$$X \operatorname{ctg} \beta X = -\xi. \quad (91.6)$$

Так как в правой части этого равенства стоит знак минус, то аргумент котангенса должен иметь значение в интервале между

$\pi/2$ и π ¹⁾. Если же принять во внимание, что величина ξ мала, то можно заключить, что оно довольно близко к $\pi/2$. Таким образом, можно написать

$$\beta X = \frac{\pi}{2} + \varepsilon, \quad \text{ctg } \beta X = -\text{tg } \varepsilon. \quad (91.7)$$

Нам нужно определить глубину потенциальной ямы, т. е. значение параметра X_0^2 в предположении, что величина ξ задана равенством (91.5б). С этой целью мы сначала вычислим величину ε : подставим X из (91.7) в равенство (91.6) и произведем там разложение по степеням ε и ξ . В результате получим

$$\varepsilon = \frac{2\beta}{\pi} \xi \left(1 - \frac{4\beta}{\pi^2} \xi + \dots \right). \quad (91.8)$$

Подставив теперь полученное выражение в соотношение

$$X_0^2 = X^2 + \xi^2 = \left[\frac{\pi}{2\beta} \left(1 + \frac{2\varepsilon}{\pi} \right) \right]^2 + \xi^2,$$

будем иметь

$$X_0^2 = \frac{\pi^2}{4\beta^2} + \frac{2\xi}{\beta} + \left(1 - \frac{4}{\pi^2} \right) \xi^2 + \dots \quad (91.9)$$

Обсудим полученный результат. Если жесткая сердцевина отсутствует, то $\beta = 1$ и X_0 должно быть чуть больше $\pi/2$. Будь $X_0 = \pi/2$, энергия связи была бы равна нулю ($\xi = 0$), но так как связь несколько сильнее ($\xi > 0$), то и яма несколько глубже. При наличии жесткой сердцевины это предельное значение параметра X_0 сдвигается и становится равным $X_0 = \pi/2\beta > \pi/2$: в этом случае, чтобы сохранить энергию связи неизменной, потенциальная яма должна быть глубже, чем в отсутствие жесткой сердцевины.

Для значения $\xi = 0,278$ мы в соответствии с формулой (91.9) получаем

$$X_0^2 = \frac{V_0}{|E_D|} \cdot \frac{R^2}{l^2} = \frac{2,467}{\beta^2} + \frac{0,557}{\beta} + 0,046 + \dots,$$

где V_0 — глубина потенциальной ямы. Если жесткой сердцевины нет ($\beta = 1$), то отсюда $X_0^2 = 3,070$ и $V_0 = 88,4$ МэВ. При наличии жесткой сердцевины радиуса $a = 0,2$ ферми ($\beta = 0,8333$) мы имеем $X_0^2 = 4,267$ и $V_0 = 122,9$ МэВ. На фиг. 53 оба потенциала изображены в соответствии с этими числовыми результатами.

¹⁾ Это утверждение справедливо, если в потенциальной яме, как в случае дейтрона, имеется только одно связанное состояние. Для ямы с двумя связанными состояниями уравнение (91.6) имело бы два корня и низшему энергетическому уровню соответствовал бы интервал $\pi < \beta X < 3/2 \pi$.

Задача 92. Низкоэнергетическое рассеяние при наличии жесткой сердцевинки и без нее

Для двух рассмотренных в предыдущей задаче дейтронных потенциалов рассчитать длину рассеяния и низкоэнергетический предел сечения рассеяния нейтронов на протонах.

Решение. Длина рассеяния a связана с предельным значением логарифмической производной при $k \rightarrow 0$ в точке $r = R$ соотношением (89.10), так что мы имеем

$$a = R \frac{L_0 - 1}{L_0}, \quad L_0 = R \frac{\chi'(R)}{\chi(R)}. \quad (92.1)$$

С другой стороны, согласно равенству (91.1), для рассматриваемых потенциалов должно быть

$$L_0 = X_0 \operatorname{ctg} \beta X_0. \quad (92.2)$$

Низкоэнергетический предел сечения рассеяния при $k \rightarrow 0$ равен

$$\sigma(0) = 4\pi a^2. \quad (92.3)$$

Так как значения параметров X_0 и β , полученные в предыдущей задаче, согласуются с правильным значением энергии связи дейтрона, то для вычисления величин a и $\sigma(0)$ мы можем просто воспользоваться формулами (92.1)—(92.3). Результаты числовых расчетов таковы:

1. Потенциальная яма без жесткой сердцевинки ($\beta = 1$, $X_0^2 = 3,070$):

$$L_0 = -0,3214, \quad a = 4,934 \text{ ферми}, \quad \sigma = 3,059 \text{ барн.}$$

2. Потенциальная яма с жесткой сердцевинкой ($\beta = 0,8333$, $X_0^2 = 4,267$):

$$L_0 = -0,3135, \quad a = 5,028 \text{ ферми}, \quad \sigma = 3,177 \text{ барн.}$$

Эти результаты представляют определенный интерес, так как они показывают, что при заданных значениях радиуса потенциальной ямы и энергии связи дейтрона наличие жесткой сердцевинки очень незначительно, всего на 3,8%, изменяет низкоэнергетическое сечение нейтрон-протонного рассеяния. Таким образом, эксперименты при низких энергиях практически не позволяют решить вопрос о существовании жесткой сердцевинки в нуклон-нуклонных взаимодействиях.

Следует отметить, что благодаря спиновой зависимости ядерных сил и большого вклада в рассеяние 1S -состояния экспериментальное сечение рассеяния фактически составляет примерно 21 барн. Полученные же из нашей модели числовые результаты хорошо согласуются с данными по рассеянию в 3S -состоянии.

Задача 93. Низкоэнергетическое рассеяние на модифицированном потенциале Пешля — Теллера

Используя сферически симметричный потенциал

$$V(r) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2 \lambda (\lambda - 1)}{2m \operatorname{ch}^2 \alpha r}, \quad (93.1)$$

являющийся результатом обобщения потенциала задачи 39 на трехмерный случай, получить сечение рассеяния в пределе малых энергий ($l=0$).

Решение. Найденные в задаче 39 одномерные решения при $l=0$ можно использовать и в трехмерном случае, следует лишь учесть, что дополнительному граничному условию $\chi_0(0)=0$ удовлетворяют только нечетные решения, поэтому ниже понадобятся лишь соотношения (39.126), (39.136) и второе из равенств (39.14). С учетом упомянутых формул имеем

$$\chi_0(r) \rightarrow \sin(kr + \delta_0), \quad (93.2)$$

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} + \arg \frac{\Gamma(ik/\alpha) e^{-i \frac{k}{\alpha} \ln 2}}{\Gamma\left(\frac{\lambda+1}{2} + i \frac{k}{2\alpha}\right) \Gamma\left(1 - \frac{\lambda}{2} + i \frac{k}{2\alpha}\right)}. \quad (93.3)$$

Дальнейшая, по существу чисто математическая, задача состоит в том, чтобы придать выражению (93.3) вид, удобный для числового расчета.

Введя обозначения

$$\frac{k}{2\alpha} = q, \quad \frac{\lambda}{2} + iq = z, \quad (93.4)$$

перепишем (93.3) в более компактной форме:

$$\delta_0 - \frac{\pi}{2} = \arg \Gamma(2iq) - 2q \ln 2 - \arg \Gamma\left(z + \frac{1}{2}\right) + \arg \Gamma(1-z). \quad (93.5)$$

Из хорошо известных тождеств

$$\Gamma(2z) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} e^{2z \ln 2} \Gamma(z) \Gamma\left(z + \frac{1}{2}\right)$$

и

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

вытекают следующие соотношения для фаз:

$$\arg \Gamma(2z) = 2 \ln 2 \cdot \operatorname{Im} z + \arg \Gamma(z) + \arg \Gamma\left(z + \frac{1}{2}\right)$$

и

$$\arg \Gamma(z) + \arg \Gamma(1-z) = -\operatorname{argsin} \pi z.$$

Исключая из них $\arg \Gamma(z)$, получаем

$$-\arg \Gamma\left(z + \frac{1}{2}\right) + \arg \Gamma(1-z) = -\arg \Gamma(2z) + 2 \ln 2 \cdot \operatorname{Im} z - \operatorname{argsin} \pi z.$$

Если теперь заменить здесь величину z ее выражением (93.4), то формула (93.5) приобретет вид

$$\delta_0 - \frac{\pi}{2} = \{\arg \Gamma(2iq) - 2q \ln 2\} + \left\{ -\arg \Gamma(\lambda + 2iq) + 2q \ln 2 - \operatorname{argsin} \pi \left(\frac{\lambda}{2} + iq \right) \right\},$$

или

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} + \arg \Gamma(2iq) - \arg \Gamma(\lambda + 2iq) - \operatorname{arctg} \left(\operatorname{ctg} \frac{\pi \lambda}{2} \operatorname{th} \pi q \right). \quad (93.6)$$

Для аргументов, фигурирующих в последнем выражении Γ -функций, имеют место следующие представления:

$$\arg \Gamma(\lambda + 2iq) = 2q \left\{ -C + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{2q} \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda + n - 1} \right) \right\}$$

и

$$\arg \Gamma(2iq) = 2q \left\{ -C + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{2q} \operatorname{arctg} \frac{2q}{n-1} \right) \right\},$$

поэтому их разность запишется в виде

$$\begin{aligned} \arg \Gamma(2iq) - \arg \Gamma(\lambda + 2iq) &= \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda + n - 1} - \operatorname{arctg} \frac{2q}{n-1} \right\} = \\ &= \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda} - \frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda + n} - \operatorname{arctg} \frac{2q}{n} \right\}. \end{aligned}$$

Отсюда окончательно получаем

$$\begin{aligned} \delta_0 &= \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda} - \operatorname{arctg} \left(\operatorname{ctg} \frac{\pi \lambda}{2} \operatorname{th} \pi q \right) + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda + n} - \operatorname{arctg} \frac{2q}{n} \right\}. \quad (93.7) \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что фаза рассеяния стремится к нулю при стремлении к нулю энергии рассеиваемой частицы ($q \rightarrow 0$). Действительно,

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{\delta_0}{2q} = \frac{1}{\lambda} - \frac{\pi}{2} \operatorname{ctg} \frac{\pi \lambda}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{\lambda + n} - \frac{1}{n} \right). \quad (93.8)$$

Что же касается сечения рассеяния

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{\alpha^2} \left(\frac{\sin \delta_0}{2q} \right)^2, \quad (93.9)$$

то оно стремится тогда к конечному пределу. Исключениями являются случаи, когда λ равно целому четному числу, т. е. когда $\operatorname{ctg} \pi\lambda/2$ обращается в бесконечность. В этих случаях сечение σ стремится к бесконечности, что можно объяснить наличием резонансного уровня в потенциальной яме, которому при рассматриваемых значениях λ соответствует энергия, в точности равная нулю.

Расчет величин δ_0 и σ по формулам (93.7) и (93.9) представляет чисто техническую задачу, и мы не будем вдаваться в соответствующие детали. Заметим лишь, что для целых λ (четных или нечетных) бесконечный ряд в формуле (93.7) вырождается в конечную сумму, а второй член в этой формуле равен либо нулю (нечетные λ), либо $\pi/2$ (четные λ), т. е., если $\lambda = 2m$,

$$\delta_0 = \frac{\pi}{2} - \sum_{n=1}^{2m-1} \operatorname{arctg} \frac{2q}{n},$$

а если $\lambda = 2m + 1$,

$$\delta_0 = - \sum_{n=1}^{2m} \operatorname{arctg} \frac{2q}{n}.$$

В том случае, когда λ не является целым числом, бесконечную сумму в формуле (93.7) можно разложить в ряд по степеням $2q$. Вводя обозначение $\lambda - N = \mu$, где N — наибольшее целое число, не превосходящее λ ($0 < \mu < 1$), можно написать

$$\sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{arctg} \frac{2q}{\lambda + n} = \sum_{n=N}^{\infty} \operatorname{arctg} \frac{2q}{n + \mu}$$

и

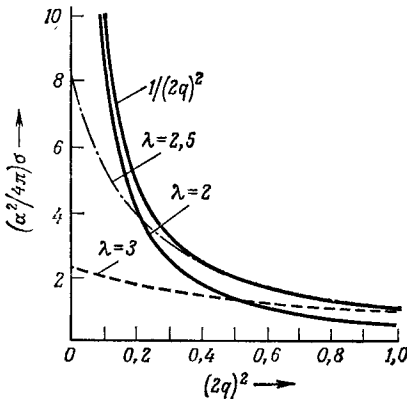
$$\sum_{n=N}^{\infty} \left\{ \operatorname{arctg} \frac{2q}{n + \mu} - \operatorname{arctg} \frac{2q}{n} \right\} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^\nu \frac{C_\nu}{2^{\nu+1}} (2q)^{2\nu+1},$$

где

$$\begin{aligned} C_\nu &= \sum_{n=N}^{\infty} \left\{ \frac{1}{(n + \mu)^{2\nu+1}} - \frac{1}{n^{2\nu+1}} \right\} = \sum_{n=N}^{\infty} \frac{1}{n^{2\nu+1}} \left[\left(1 + \frac{\mu}{n} \right)^{-(2\nu+1)} - 1 \right] = \\ &= \sum_{n=N}^{\infty} \frac{1}{n^{2\nu+1}} \left\{ -(2\nu+1) \frac{\mu}{n} + \binom{-(2\nu+1)}{2} \frac{\mu^2}{n^2} + \dots \right\}. \end{aligned}$$

Каждый член этого биномиального разложения можно выразить через ζ -функцию от аргументов $2\nu+2$, $2\nu+3$ и т. д. Предлагаемый метод приводит к представлению фазы δ_0 в виде быстро сходящегося ряда.

Некоторые результаты числовых расчетов показаны на фиг. 54, где изображена зависимость сечения рассеяния от энергии падающих частиц (обе величины взяты в подходящих единицах). Гипербола $1/(2q)^2$ соответствует предельному значению сечения



Фиг. 54. Сечения рассеяния на трех различных модифицированных потенциалах Пешля — Теллера.

Гипербола определяет предел $4\pi/k^2$, который никогда не может быть превзойден сечением σ_0 .

$\sigma = 4\pi/k^2$; оно всегда превосходит значение парциального сечения рассеяния с $l = 0$. В случае $\lambda = 2$ мы имеем резонанс при нулевом значении энергии, для двух других кривых, соответствующих значениям $\lambda = 2,5$ и $\lambda = 3$, предельное сечение рассеяния конечно. В случае $\lambda = 2,5$ вблизи точки $(2q)^2 = 0,6$ имеется виртуальный уровень ($\delta_0 = \pi/2$), поэтому кривая сечения рассеяния в этой области энергий проходит очень близко от предельной гиперболы. Для значения $\lambda = 4$ (эта кривая не показана на фигуре) сечение спадает до нуля ($\delta_0 = \pi$) в точке $(2q)^2 = 1$, но затем по мере роста энергии снова возрастает.

Задача 94. Радиальное интегральное уравнение

Заменить радиальное уравнение Шредингера

$$\chi_l'' + \left[k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0, \tag{94.1}$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{и} \quad U(r) = \frac{2mV(r)}{\hbar^2},$$

интегральным уравнением. Каким образом превратить это уравнение в интегральное уравнение с симметричным ядром? Как записать интегральное выражение для асимптотического значения фазы волновой функции χ_l ? Как связано решение этого уравнения, найденное методом последовательных приближений, с последовательными борновскими приближениями?

Решение. Уравнение (94.1) формально можно записать в виде неоднородного дифференциального уравнения

$$D\chi_l = F(r), \tag{94.2}$$

где

$$D = \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}, \tag{94.3}$$

$$F(r) = U(r) \chi_l(r),$$

а выражение $F(r)$ можно рассматривать в качестве неоднородности. Однородное уравнение

$$D\chi_l = 0$$

имеет фундаментальную систему решений

$$j_l(kr) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right), \quad n_l(kr) \rightarrow -\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (94.4)$$

Общее решение неоднородного уравнения (94.2) представляет собой суперпозицию общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородного уравнения, причем последнее определяется функцией Грина $G(r, r')$. Таким образом, имеем

$$\chi_l(r) = Aj_l(kr) + Bn_l(kr) + \int_0^{\infty} G(r, r') F(r') dr'. \quad (94.5)$$

Функция Грина $G(r, r')$ определяется как решение уравнений

$$DG(r, r') = \delta(r - r') \text{ и } D'G(r, r') = \delta(r - r'),$$

и ее можно взять, например, в виде

$$G(r, r') = \begin{cases} \frac{1}{k} j_l(kr) n_l(kr'), & r < r', \\ \frac{1}{k} j_l(kr') n_l(kr), & r > r'. \end{cases} \quad (94.6)$$

Так как нас интересует только волновая функция $\chi_l(r)$, регулярная в точке $r=0$, то в равенстве (94.5) мы должны положить $B=0$; кроме того, мы можем выбрать такую нормировку, при которой $A=1$. В результате искомое интегральное уравнение приобретает вид

$$\chi_l(r) = j_l(kr) + \int_0^{\infty} G(r, r') U(r') \chi_l(r') dr'. \quad (94.7)$$

Теперь можно перейти к ответам на вопросы, поставленные в условии задачи.

а. Симметричное ядро. Неоднородное интегральное уравнение (94.7) имеет несимметричное ядро $G(r, r') U(r')$. Однако с помощью подстановки

$$y(r) = \sqrt{U(r)} \chi_l(r), \quad f(r) = \sqrt{U(r)} j_l(kr), \quad (94.8)$$

$$K(r, r') = \sqrt{U(r) U(r')} G(r, r')$$

оно преобразуется в уравнение

$$y(r) = f(r) + \int_0^{\infty} K(r, r') y(r') dr' \quad (94.9)$$

с симметричным ядром

$$K(r, r') = K(r', r). \tag{94.10}$$

В преимуществах такого преобразования позволяет убедиться задача 95.

б. Асимптотическое значение фазы. Если нас интересует решение $\chi_l(r)$ интегрального уравнения (94.7) при больших значениях r , то мы можем во всей области интегрирования пользоваться тем выражением функции Грина из (94.6), которое написано для $r > r'$. Эта возможность обусловлена наличием под знаком интеграла множителя $U(r')$, благодаря которому основной вклад в интеграл происходит от области $0 \leq r' < R$, где R — величина порядка атомных размеров. С учетом изложенных соображений получаем

$$\chi_l(r) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) - \frac{1}{k} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \int_0^\infty U(r') j_l(kr') \chi_l(r') dr'. \tag{94.11}$$

Последнее выражение можно записать по-иному:

$$\chi_l(r) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \cdot \frac{1}{\cos \delta_l}, \tag{94.12}$$

где асимптотическое значение фазы δ_l определяется интегралом

$$\text{tg } \delta_l = -\frac{1}{k} \int_0^\infty U(r) j_l(kr) \chi_l(r) dr. \tag{94.13}$$

в. Последовательные приближения. Эти приближения к решению нашего интегрального уравнения имеют вид последовательности Неймана:

$$\chi_l^{(0)} = j_l(kr), \tag{94.14a}$$

$$\chi_l^{(1)} = j_l(kr) + \int_0^\infty G(r, r') U(r') j_l(kr') dr', \tag{94.14б}$$

.....

$$\chi_l^{(n)} = j_l(kr) + \int_0^\infty G(r, r') U(r') \chi_l^{(n-1)}(r') dr'. \tag{94.14в}$$

Можно показать, что рекуррентная формула (94.14в) с точностью до нормировочных постоянных совпадает с формулой n -го борновского приближения (см. задачу 105):

$$u_n(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(r') u_{n-1}(\mathbf{r}') d^3x'. \tag{94.15}$$

Чтобы убедиться в эквивалентности соотношений (94.14в) и (94.15), разложим функции, фигурирующие в (94.15), по парци-

альным волнам. Мы имеем (см. задачи 81 и 82)

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l \tilde{\chi}_l^{(n)}(r) Y_{l,0}(\vartheta) \quad (94.16)$$

и

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{l,0}(\vartheta), \quad (94.17)$$

кроме того,

$$\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} = \frac{1}{rr'} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} \Gamma_l(r, r') Y_{l,0}(\gamma), \quad (94.18a)$$

где

$$\Gamma_l(r, r') = \begin{cases} \frac{i}{k} j_l(kr) h_l^{(1)}(kr'), & r < r', \\ \frac{i}{k} h_l^{(1)}(kr) j_l(kr'), & r > r', \end{cases} \quad (94.18b)$$

а γ — угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' .

Выделим теперь из рекуррентного соотношения (94.15) l -ю парциальную волну. Для этого умножим обе части (94.15) на $Y_{l,0}(\vartheta)$ и проинтегрируем по всем направлениям вектора \mathbf{r} . Учтывая, что

$$\oint Y_{l,0}(\vartheta) Y_{l,0}(\gamma) d\Omega = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,0}(\vartheta'),$$

в результате получаем

$$\tilde{\chi}_l^{(n)}(r) = j_l(kr) -$$

$$-\frac{k}{4\pi} i^{-l} \int U(r') u_{n-1}(\mathbf{r}') \frac{1}{r'} \Gamma_l(r, r') \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,0}(\vartheta') d^3x'.$$

В последнем интеграле вместо функции $u_{n-1}(\mathbf{r}')$ мы можем взять ее разложение, аналогичное разложению (94.16). Это даст

$$\tilde{\chi}_l^{(n)}(r) = j_l(kr) - \int_0^{\infty} U(r') \Gamma_l(r, r') \tilde{\chi}_l^{(n-1)}(r') dr'. \quad (94.19)$$

Полученное рекуррентное соотношение уже очень похоже на соотношение (94.14в). Чтобы убедиться в их идентичности, заменим сферическую функцию Ханкеля в выражении для Γ_l в соответствии с ее определением

$$h_l^{(1)} = j_l + in_l.$$

В результате имеем

$$\Gamma_l(r, r') = \frac{i}{k} j_l(kr) j_l(kr') - G(r, r'), \quad (94.20)$$

где через G обозначена функция Грина, определенная равенством (94.6). Первый член выражения (94.20) приводит к интегралу, который пропорционален $j_l(kr)$, и его можно объединить с первым членом в правой части (94.19), поэтому

$$\tilde{\chi}_l^{(n)}(r) = A j_l(kr) + \int_0^\infty U(r') G(r, r') \tilde{\chi}_l^{(n-1)}(r') dr', \quad (94.21)$$

причем постоянная A определяется равенством

$$A = 1 - \frac{i}{k} \int_0^\infty U(r') j_l(kr') \tilde{\chi}_l^{(n-1)}(r') dr'. \quad (94.22)$$

Если отвлечься от этой постоянной, которая ведет лишь к некоторому изменению нормировки, то последнее соотношение действительно идентично рекуррентной формуле (94.14в).

Замечание. Если сравнивать точное интегральное уравнение (94.7) для функции $\chi_l(r)$ с точным интегральным уравнением

$$u(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(r') u(\mathbf{r}') d^3x', \quad (94.15a)$$

то для этого достаточно в (94.21) опустить верхние индексы $n-1$, n и т. д. Полагая теперь

$$\tilde{\chi}_l(r) = A \chi_l(r),$$

мы видим, что интегральное уравнение, аналогичное уравнению (94.21), преобразуется в уравнение (94.7), а формула (94.22) заменяется формулой

$$A = 1 - \frac{i}{k} A \int_0^\infty U(r') j_l(kr') \chi_l(r') dr'. \quad (94.22a)$$

Эту формулу можно упростить, воспользовавшись соотношением (94.13):

$$A = 1 + iA \operatorname{tg} \delta_l,$$

или

$$A = e^{i\delta_l} \cos \delta_l.$$

Разложение (94.16), если учесть асимптотическую формулу (94.12), теперь дает

$$u(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l e^{i\delta_l} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) Y_{l,0}(\vartheta),$$

что находится в полном согласии с найденной ранее формулой (82.9).

Задача 95. Вариационный принцип Швингера

Исходя из выведенного в предыдущей задаче интегрального уравнения с симметричным ядром, установить вариационный принцип для определения фазы рассеяния.

Решение. Оставляя неоднородность в правой части, запишем интегральное уравнение (94.9) в виде

$$y(r) - \int_0^{\infty} K(r, r') y(r') dr' = f(r). \quad (95.1)$$

Умножим обе части этого уравнения на $y(r)$ и проинтегрируем по r . Это даст

$$I_1 = I_2, \quad (95.2)$$

где

$$I_1 = \int_0^{\infty} dr y(r) \left\{ y(r) - \int_0^{\infty} K(r, r') y(r') dr' \right\} \quad (95.3)$$

и

$$I_2 = \int_0^{\infty} y(r) f(r) dr. \quad (95.4)$$

Эти два интеграла равны между собой при условии, что функция $y(r)$ удовлетворяет уравнению (95.1). Из предыдущей задачи нам известно, что

$$I_2 = \int_0^{\infty} U(r) j_l(kr) \chi_l(r) dr = -k \operatorname{tg} \delta_l. \quad (95.5)$$

Возьмем теперь вместо истинного решения $y(r)$ близкую к нему функцию $y(r) + \delta y(r)$. При этом несколько изменятся и значения наших интегралов:

$$\delta I_1 = 2 \int_0^{\infty} dr \delta y(r) \left\{ y(r) - \int_0^{\infty} K(r, r') y(r') dr' \right\} \quad (95.6)$$

и

$$\delta I_2 = \int_0^{\infty} \delta y(r) f(r) dr. \quad (95.7)$$

Следует заметить, что равенство (95.6) написано в предположении, что ядро интегрального уравнения симметрично. Дело в том, что при варьировании $y(r')$ первоначально возникает вариация $\delta y(r')$, и, чтобы вернуться к вариации $\delta y(r)$, мы должны в правой части равенства (95.6) произвести замену переменных интегрирования, в результате которой ядро $K(r, r')$ перейдет в ядро $K(r', r)$.

Так как выше $y(r)$ означает истинное решение интегрального уравнения (95.1), то в правой части равенства (95.6) выражение, стоящее в фигурных скобках, можно заменить функцией $f(r)$, поэтому мы получаем

$$\delta I_1 = 2\delta I_2. \quad (95.8)$$

Последнее равенство с помощью соотношения (95.2) можно записать по-иному:

$$\frac{\delta I_1}{I_1} - 2 \frac{\delta I_2}{I_2} = 0,$$

или

$$\delta \left(\frac{I_1}{I_2^2} \right) = 0. \quad (95.9)$$

Это и есть искомый вариационный принцип. Согласно этому принципу, требуется, чтобы величина $S_l = I_1/I_2^2$, или, подробнее, величина

$$S_l = \frac{\int_0^\infty dr U(r) \chi_l(r) \left\{ \chi_l(r) - \int_0^\infty \chi_l(r') U(r') G(r, r') dr' \right\}}{\left[\int_0^\infty U(r) \chi_l(r) j_l(kr) dr \right]^2}, \quad (95.10)$$

была экстремальна и, следовательно, чтобы

$$\delta S_l = 0. \quad (95.11)$$

Смысл величины S_l нетрудно установить, если принять во внимание равенство (95.5) и учесть, что $I_1 = I_2$. Мы имеем

$$S_l = -\frac{1}{k} \operatorname{ctg} \delta_l. \quad (95.12)$$

Таким образом, экстремальное значение величины S_l непосредственно связано с правильным значением фазы рассеяния δ_l .

Следует отметить, что сформулированный вариационный принцип не зависит от нормировки волновой функции. В этом легко убедиться, заменив в (95.10) волновую функцию χ_l функцией $C\chi_l$. В результате этой замены числитель и знаменатель дроби (95.10) умножаются на C^2 , поэтому сама величина S_l остается неизменной.

Замечание. В области очень малых энергий ($k \rightarrow 0$), когда взаимодействие имеет характер притяжения, в рассеянии участвует только s -волна ($l=0$). Как было показано в задаче 88, в этом случае мы можем ввести длину рассеяния

$$a_0 = -\frac{1}{k} \operatorname{tg} \delta_0.$$

Равенство (95.12) показывает, что

$$\lim_{k \rightarrow 0} k^2 S_0(k) = \frac{1}{a_0},$$

поэтому сформулированный вариационный принцип с успехом можно использовать для определения длины рассеяния.

Литература

Schwinger J., Phys. Rev., **72**, 742A (1947).

Blatt J. M., Jackson J. D., Phys. Rev., **76**, 18 (1949).

Задача 96. Последовательные приближения для фазы рассеяния

Радиальное уравнение Шредингера для s -волны формально можно рассматривать как неоднородное дифференциальное уравнение, считая неоднородностью член, содержащий потенциальную энергию. „Решение“ этого уравнения представляет собой интегральное уравнение для функции χ_0 , и его можно решать методом последовательных приближений. Используя указанную процедуру, найти интегральное выражение для второго приближения к функции $\text{tg } \delta_0$.

Решение. Радиальное уравнение Шредингера при $l=0$ запишем в виде

$$\chi'' + k^2 \chi = U \chi, \quad U = \frac{2m}{\hbar^2} V(r). \quad (96.1)$$

Здесь и далее мы опускаем индекс 0 у функций χ_0 , δ_0 и т. д. Рассматривая в этом уравнении правую часть как неоднородность, мы можем выразить его решение через функцию Грина $G(r, r')$, которая является решением уравнений

$$\frac{\partial^2 G}{\partial r'^2} + k^2 G = \delta(r - r') = \frac{\partial^2 G}{\partial r'^2} + k^2 G. \quad (96.2)$$

Таким образом, имеем

$$\chi(r) = A \sin kr + B \cos kr + \int_0^{\infty} G(r, r') U(r') \chi(r') dr'. \quad (96.3)$$

Функцию Грина в (96.3) можно выбирать различными способами, для дальнейшего ее удобно взять в виде

$$G(r, r') = \begin{cases} -\frac{1}{k} \sin k(r' - r), & r' < r, \\ 0, & r' > r, \end{cases} \quad (96.4)$$

так как при этом мы сможем удовлетворить граничному условию $\chi(0) = 0$, просто положив $B = 0$. Выбирая далее в качестве условия нормировки, которая не является существенной для определения фаз, условие $A = 1$, мы приходим к интегральному уравнению Вольтерра

$$\chi(r) = \sin kr - \frac{1}{k} \int_0^r \sin k(r' - r) U(r') \chi(r') dr'. \quad (96.5)$$

Расписав $\sin k(r' - r)$, мы можем представить наше решение $\chi(r)$ в виде

$$\chi(r) = C(r) \sin kr + S(r) \cos kr, \quad (96.6a)$$

где

$$C(r) = 1 + \frac{1}{k} \int_0^r \cos kr' U(r') \chi(r') dr', \quad (96.6б)$$

$$S(r) = -\frac{1}{k} \int_0^r \sin kr' U(r') \chi(r') dr'.$$

Обе амплитудные функции $C(r)$ и $S(r)$ при $r \rightarrow \infty$ стремятся к конечным пределам при условии, что потенциал ведет себя как r^{-q} , где $q > 1$, в этом предельном случае из (96.6а) следует:

$$\chi(r) \sim \sin(kr + \delta).$$

Таким образом, фазу рассеяния δ мы можем определить из соотношения

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{S(\infty)}{C(\infty)}. \quad (96.7)$$

Выражения (96.6б) совместно с соотношением (96.7) дают строгое решение задачи.

Интересующие нас последовательные (борновские) приближения строятся в предположении, что потенциал $U(r)$ является величиной первого порядка малости. Для удобства выкладок будем временно писать λU вместо U и разложим функцию χ в ряд по степеням „параметра порядка“ λ :

$$\chi = \chi_0 + \lambda \chi_1 + \lambda^2 \chi_2 + \dots, \quad (96.8)$$

где индексы, очевидно, означают порядковые номера приближений. Уравнение (96.5) во втором приближении записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} & \chi_0(r) + \lambda \chi_1(r) + \lambda^2 \chi_2(r) + \dots = \\ & = \sin kr - \frac{\lambda}{k} \int_0^r \sin k(r-r') U(r') \{ \chi_0(r') + \lambda \chi_1(r') + \dots \} dr'. \end{aligned}$$

Отсюда, приравнявая члены одинакового порядка малости, получаем

$$\chi_0(r) = \sin kr, \quad (96.9а)$$

$$\chi_1(r) = -\frac{1}{k} \int_0^r \sin k(r-r') U(r') \sin kr' dr', \quad (96.9б)$$

$$\begin{aligned} \chi_2(r) &= \frac{1}{k^2} \int_0^r dr' \sin k(r-r') U(r') \times \\ & \times \int_0^{r'} \sin k(r''-r') U(r'') \sin kr'' dr''. \end{aligned} \quad (96.9в)$$

Здесь χ_0 представляет собой вклад от невозмущенной плоской волны. В первом порядке имеем $\chi = \chi_0 + \chi_1$, и, расписывая снова $\sin k(r' - r)$ так, как это было сделано при получении соотношений (96.6), находим

$$\begin{aligned} C(r) &= 1 + \frac{1}{k} \int_0^r U(r') \cos kr' \sin kr' dr', \\ S(r) &= -\frac{1}{k} \int_0^r U(r') \sin^2 kr' dr'. \end{aligned} \quad (96.10)$$

Таким образом, в первом порядке амплитуду $S(r)$ можно отождествить с выражением (96.7), так что для фазы рассеяния мы имеем формулу

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} U(r') \sin^2 kr' dr', \quad (96.11)$$

которая, действительно, совпадает с формулой первого борновского приближения (см. задачу 106). Во втором порядке к приведенным выражениям мы должны добавить функцию χ_2 . Это даст

$$\begin{aligned} C(r) &= 1 + \frac{1}{k} \int_0^r dr' U(r') \cos kr' \times \\ &\quad \times \left\{ \sin kr' - \frac{1}{k} \int_0^{r'} U(r'') \sin k(r'' - r') \sin kr'' dr'' \right\}, \\ S(r) &= -\frac{1}{k} \int_0^r dr' U(r') \sin kr' \times \\ &\quad \times \left\{ \sin kr' - \frac{1}{k} \int_0^{r'} U(r'') \sin k(r'' - r') \sin kr'' dr'' \right\}. \end{aligned} \quad (96.12)$$

Мы видим, что наше приближение представляет собой разложение по отрицательным степеням k в соответствии с тем, что борновский метод применим в области высоких энергий. Наряду с возрастающими отрицательными степенями величины k в высших приближениях появляются и все более высокие степени потенциала U .

Если теперь подставить выражения (96.12) в формулу (96.7) для $\operatorname{tg} \delta$, то величину $1/C(\infty)$ мы можем разложить аналогичным образом. Так как $S(\infty)$ пропорционально $1/k$, то амплитуду $C(\infty)$ можно взять в первом приближении, если нас интересует результат, верный лишь с точностью до членов $1/k^2$ включительно.

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \delta = & \left\{ -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} U(r) \sin^2 kr \, dr + \right. \\ & \left. + \frac{1}{k^2} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin kr \int_0^r U(r') \sin k(r-r) \sin kr' \, dr' \right\} \times \\ & \times \left\{ 1 - \frac{1}{k} \int_0^{\infty} U(r') \cos kr' \sin kr' \, dr' \right\} = -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} U(r) \sin^2 kr \, dr + \\ & + \frac{1}{k^2} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin^2 kr \int_0^{\infty} U(r') \sin kr' \cos kr' \, dr' + \\ & + \frac{1}{k^2} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin kr \int_0^r U(r') \sin k(r-r) \sin kr' \, dr'. \end{aligned}$$

После очевидной перегруппировки членов, имеющих порядок $1/k^2$, окончательному результату можно придать одну из следующих форм:

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin^2 kr \left\{ 1 - \frac{1}{k} \int_r^{\infty} U(r') \sin 2kr' \, dr' \right\}, \quad (96.12a)$$

или

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin kr \left\{ \sin kr - \frac{2}{k} \cos kr \int_0^r U(r') \sin^2 kr' \, dr' \right\}. \quad (96.12b)$$

Это есть приближение второго порядка для фазы рассеяния.

Замечание. Данный метод можно применять к парциальным волнам с $l > 0$. Единственное отличие состоит в том, что тригонометрические функции $\sin kr$ и $\cos kr$ придется заменить на сферические функции Бесселя $j_l(kr)$ и $-n_l(kr)$.

Задача 97. Уравнение Калоджеро

Для отношения

$$t(r) = \frac{S(r)}{C(r)}, \quad (97.1)$$

где $S(r)$ и $C(r)$ — амплитудные функции, введенные в предыдущей задаче, вывести нелинейное дифференциальное уравнение первого порядка. Найти приближенное решение этого уравнения, соответствующее второму борновскому приближению.

Решение. Мы показали, что в выражении

$$\chi(r) = C(r) \sin kr + S(r) \cos kr \quad (97.2)$$

амплитудные функции и их производные определяются соотношениями

$$\begin{aligned} C(r) &= 1 + \frac{1}{k} \int_0^r U(r') \cos kr' \chi(r') dr', \\ C'(r) &= \frac{1}{k} U(r) \cos kr \chi(r), \\ S(r) &= -\frac{1}{k} \int_0^r U(r') \sin kr' \chi(r') dr', \\ S'(r) &= -\frac{1}{k} U(r) \sin kr \chi(r). \end{aligned} \quad (97.3)$$

Дифференцируя равенство (97.1), получаем

$$t' = \frac{CS' - SC'}{C^2},$$

где

$$CS' - SC' = -\frac{U}{k} \chi \{C \sin kr + S \cos kr\} = -\frac{U}{k} \chi^2(r).$$

Следовательно,

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{1}{k} U(r) \{\sin kr + t(r) \cos kr\}^2. \quad (97.4)$$

Это и есть искомое дифференциальное уравнение для $t(r)$, известное как уравнение Калоджеро.

Последовательные борновские приближения нетрудно получить, заменив опять U на λU и разложив затем функцию $t(r)$ в ряд по степеням λ . Мы имеем

$$t = \lambda t_1 + \lambda^2 t_2 + \lambda^3 t_3 + \dots \quad (97.5)$$

Приравнявая теперь в уравнении (97.4) члены одинакового порядка малости, находим

$$t'_1 = -\frac{U}{k} \sin^2 kr, \quad (97.6a)$$

$$t'_2 = -\frac{U}{k} t_1 \sin 2kr, \quad (97.6b)$$

$$t'_3 = -\frac{U}{k} \{t_2 \sin 2kr + t_1 \cos^2 kr\} \quad (97.6b)$$

и т. д. Каждое последующее уравнение этой цепочки допускает решение в квадратурах.

Уравнение (97.6а) соответствует первому борновскому приближению, и его решение имеет вид

$$t_1(r) = -\frac{1}{k} \int_0^r U(r') \sin^2 kr' dr', \quad (97.7)$$

так что для фазы рассеяния в этом приближении получается формула

$$\operatorname{tg} \delta = t_1(\infty) = -\frac{1}{k} \int_0^\infty U(r) \sin^2 kr dr. \quad (97.8)$$

Во втором борновском приближении $t = t_1 + t_2$, поэтому с учетом уравнений (97.6а) и (97.6б) имеем

$$t(r) = -\frac{1}{k} \int_0^r dr' U(r') \sin kr' \left\{ \sin kr' - \frac{2}{k} \cos kr' \int_0^{r'} U(r'') \sin^2 kr'' dr'' \right\}, \quad (97.9)$$

и, следовательно,

$$\operatorname{tg} \delta = -\frac{1}{k} \int_0^\infty dr U(r) \sin kr \left\{ \sin kr - \frac{2}{k} \cos kr \int_0^r U(r') \sin^2 kr' dr' \right\} \quad (97.10)$$

в полном согласии с формулой (96.12б) предыдущей задачи.

Задача 98. Линеаризация уравнения Калоджеро

Найти приближенное решение дифференциального уравнения Калоджеро (97.4) в предположении, что $|t(\infty)| \ll 1$.

Решение. В правой части уравнения Калоджеро

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{1}{k} U(r) \{\sin kr + t(r) \cos kr\}^2, \quad (98.1)$$

или

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{U}{k} \{\sin^2 kr + t \sin 2kr + t^2 \cos^2 kr\},$$

последний член при малых $t(r)$ можно отбросить. Таким образом, приближенное решение \tilde{t} должно удовлетворять линейному уравнению вида

$$\frac{d\tilde{t}}{dr} = -\frac{U}{k} \{\sin^2 kr + \tilde{t} \sin 2kr\}. \quad (98.2)$$

Сравнивая уравнение (98.2) с уравнением для второго борновского приближения

$$\frac{d}{dr} (t_1 + t_2) = -\frac{U}{k} \{\sin^2 kr + t_1 \sin 2kr\},$$

которое легко получается из (97.6), мы находим, что второе борновское приближение несколько хуже, чем приближение (98.2). В правой части уравнения (98.2) вместо функции t_1 фигурирует сама функция \tilde{t} , что эквивалентно включению в уравнение первого члена из третьего борновского приближения (97.6в). Таким образом, линеаризация сразу же приводит к решению, которое в качественном отношении занимает промежуточное положение между вторым и третьим борновскими приближениями.

Решение уравнения (98.2), удовлетворяющее граничному условию

$$\tilde{t}(0) = 0, \quad (98.3)$$

находится стандартным методом и имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{t}(r) = & -\frac{1}{k} \int_0^r dr' U(r') \sin^2 kr' \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{k} \int_r^r U(r'') \sin 2kr'' dr'' \right\}. \end{aligned} \quad (98.4)$$

Разлагая здесь экспоненту по степеням $1/k$, мы можем вернуться ко второму борновскому приближению. Следует подчеркнуть, что приближение (98.4) значительно лучше борновского, так как даже при очень малых значениях k [или же при очень больших значениях $U(r)$, как в случае сингулярных потенциалов], когда формулы борновских приближений теряют смысл, мы все еще имеем вполне определенное решение по крайней мере для потенциалов, соответствующих силам отталкивания.

Задача 99. Длина рассеяния потенциала, имеющего вид степенной функции

Определить длину рассеяния потенциала, описываемого формулой

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(r) \equiv U(r) = \frac{g^2}{r_0^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n, \quad (99.1)$$

а) путем точного интегрирования уравнения Шредингера при $k=0$;

б) путем решения линеаризованного уравнения Калоджеро.

Решение

а. Радиальное уравнение Шредингера для случая $l=0$ и $k=0$ имеет вид

$$\chi_0'' - g^2 x^{-n} \chi_0 = 0, \quad x = \frac{r}{r_0}. \quad (99.2)$$

Решением этого уравнения, удовлетворяющим граничному условию $\chi_0(0) = 0$, является функция

$$\chi_0 \doteq C \sqrt{x} K_{\frac{1}{2\lambda}} \left(\frac{g}{\lambda} x^{-\lambda} \right), \quad \lambda = \frac{n-2}{2}, \quad (99.3)$$

где $K_\nu(z)$ означает модифицированную функцию Ханкеля

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \sin \nu\pi} [I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)] = \frac{i\pi}{2} e^{\frac{i\nu\pi}{2}} H_\nu^{(1)}(iz), \quad (99.4)$$

асимптотика которой при $|z| \rightarrow \infty$ имеет вид

$$K_\nu(z) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}. \quad (99.5)$$

Когда значения переменной x очень малы, аргумент функции K в (99.3) становится большим и мы можем воспользоваться формулой (99.5). В результате имеем

$$\chi_0 \approx C \sqrt{\frac{\pi\lambda}{2g}} x^{\frac{\lambda+1}{2}} e^{-\frac{g}{\lambda} x^{-\lambda}}.$$

Функция χ_0 , очевидно, удовлетворяет граничному условию $\chi_0(0) = 0$.

С другой стороны, если значения x велики и значения z малы, то мы можем воспользоваться степенными разложениями функций $I_{\pm\nu}(z)$, что с учетом равенства (99.4) дает

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \sin \nu\pi} \left\{ \frac{1}{\Gamma(1-\nu)} \left(\frac{z}{2} \right)^{-\nu} \left[1 + \frac{z^2}{4(1-\nu)} + \dots \right] - \frac{1}{\Gamma(1+\nu)} \left(\frac{z}{2} \right)^\nu \left[1 + \frac{z^2}{4(1+\nu)} + \dots \right] \right\}.$$

Чтобы получить асимптотическую формулу для функции χ_0 при больших значениях r , мы оставим у каждого слагаемого в фигурных скобках только главный член разложения. В результате имеем

$$\chi_0(x) = C \sqrt{x} \frac{\pi}{2 \sin \frac{\pi}{2\lambda}} \left\{ \frac{1}{\Gamma\left(1 - \frac{1}{2\lambda}\right)} \left(\frac{2\lambda}{g}\right)^{\frac{1}{2\lambda}} \sqrt{x} - \frac{1}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{2\lambda}\right)} \left(\frac{g}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{2\lambda}} \frac{1}{\sqrt{x}} \right\}. \quad (99.6)$$

Последнее выражение представляет собой линейную функцию переменной x , и его можно записать в виде

$$\chi_0(x) = A \left(1 - \frac{r_\nu x}{a} \right), \quad (99.7)$$

где a по определению есть длина рассеяния (см. задачу 88). Сравнивая выражения (99.6) и (99.7), получаем

$$a = r_0 \frac{\Gamma\left(1 - \frac{1}{2\lambda}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{1}{2\lambda}\right)} \left(\frac{g}{2\lambda}\right)^{\frac{1}{\lambda}}. \quad (99.8)$$

6. С помощью линеаризации уравнения Калоджеро мы нашли [см. соотношение (98.4)]

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \delta_0 = & -\frac{g^2}{kr_0^2} \int_0^{\infty} dr \left(\frac{r_0}{r}\right)^n \sin^2 kr \times \\ & \times \exp \left\{ -\frac{g^2}{kr_0^2} \int_r^{\infty} \left(\frac{r_0}{r'}\right)^n \sin 2kr' dr' \right\}; \end{aligned} \quad (99.9)$$

кроме того, для случая асимптотического поведения χ_0 при $k \rightarrow 0$ имеем

$$\begin{aligned} \chi_0 \sim \sin(kr + \delta_0) = \sin kr \cos \delta_0 + \\ + \cos kr \sin \delta_0 \rightarrow \sin \delta_0 (1 + kr \operatorname{ctg} \delta_0). \end{aligned}$$

Сравнивая это выражение с равенством (99.7), мы приходим к формуле, определяющей длину рассеяния через фазу рассеяния:

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\operatorname{tg} \delta_0}{k}. \quad (99.10)$$

Подставляя сюда выражение (99.9) и используя в качестве безразмерных переменных интегрирования величины $r/r_0 = x$ и $r'/r_0 = y$, получаем следующее приближенное выражение для длины рассеяния:

$$\tilde{a} = g^2 r_0 \int_0^{\infty} dx x^{2-n} \exp \left(-2g^2 \int_x^{\infty} y^{1-n} dy \right).$$

Показатель экспоненты легко вычисляется и равен $-2g^2 x^{2-n}/(n-2)$, а оставшийся интеграл с помощью подстановки

$$t = \frac{2g^2}{n-2} x^{2-n} = \frac{g^2}{\lambda} x^{-2\lambda}$$

сводится к интегралу Эйлера, так что окончательно имеем

$$\tilde{a} = \frac{1}{2} r_0 \left(\frac{g^2}{\lambda}\right)^{\frac{1}{2\lambda}} \Gamma\left(1 - \frac{1}{2\lambda}\right). \quad (99.11)$$

Это приближенное выражение можно сравнить с точной формулой (99.8). В обоих случаях длина рассеяния одинаковым образом зависит от безразмерной константы взаимодействия g^2 ,

а отношение приближенного и точного выражений

$$\frac{\tilde{a}}{a} = \frac{1}{2} \Gamma\left(1 + \frac{1}{2\lambda}\right) (4\lambda)^{\frac{1}{2\lambda}} \quad (99.12)$$

представляет собой функцию λ , т. е. зависит только от показателя $n = 2(\lambda + 1)$ в выражении для потенциала. О качестве приближения (99.11) можно судить по приведенной таблице:

| n | \tilde{a}/a |
|----------|---------------|
| 3 | 1 |
| 4 | 0,886 |
| 5 | 0,810 |
| 6 | 0,762 |
| 8 | 0,702 |
| 10 | 0,665 |
| 12 | 0,642 |
| ∞ | 0,500 |

Мы видим, что при $n = 3$ отклонение отсутствует, затем ошибка возрастает и становится равной 50% в случае жесткой сферы ($n = \infty$).

Задача 100. Второе приближение к уравнению Калоджеро

Связать процедуру линеаризации уравнения Калоджеро с методом последовательных приближений и на этой основе вычислить во втором приближении длину рассеяния потенциала, рассмотренного в предыдущей задаче.

Решение. Если точное уравнение

$$\frac{dt}{dr} = -\frac{U}{k} \{\sin^2 kr + t \sin 2kr + t^2 \cos^2 kr\} \quad (100.1)$$

заменить цепочкой уравнений

$$\frac{dt_n}{dr} = -\frac{U}{k} \{\sin^2 kr + t_n \sin 2kr + t_{n-1}^2 \cos^2 kr\}, \quad t_0 = 0, \quad (100.2)$$

то в первом приближении мы снова получим линейное уравнение

$$\frac{dt_1}{dr} = -\frac{U}{k} \{\sin^2 kr + t_1 \sin 2kr\}, \quad (100.3)$$

решенное нами в задаче 98. Каждое последующее приближение получается из предыдущего путем решения линейного уравнения в квадратурах, только в разных случаях приходится иметь дело

с различными неоднородностями:

$$t_n(r) = -\frac{1}{k} \int_0^r dr' U(r') [\sin^2 kr' + t_{n-1}^2(r') \cos^2 kr'] \times \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{k} \int_{r'}^r U(r'') \sin 2kr'' dr'' \right\}. \quad (100.4)$$

Таким образом, чтобы найти второе приближение, нам достаточно в подынтегральное выражение для линеаризованного решения ввести дополнительный множитель

$$[1 + t_1^2(r') \operatorname{ctg}^2 kr']. \quad (100.5)$$

Что же касается длины рассеяния, то здесь можно добиться еще больших упрощений. Введем „интерполированную“ длину рассеяния $a(r)$, определив ее соотношением

$$a(r) = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{t(r)}{k}. \quad (100.6)$$

В первом приближении имеем

$$a_1(r) = \int_0^r dr' U(r') r'^2 \exp \left\{ -2 \int_{r'}^r U(r'') r'' dr'' \right\}. \quad (100.7)$$

Отсюда для длины рассеяния во втором приближении [$a_2 \equiv a_2(\infty)$] получаем

$$a_2 = \int_0^\infty dr U(r) r^2 \left[1 + \frac{a_1^2(r)}{r^2} \right] \exp \left\{ -2 \int_r^\infty U(r') r' dr' \right\}. \quad (100.8)$$

Соотношения (100.7) и (100.8) теперь можно использовать для вычисления длины рассеяния потенциала

$$U(r) = \frac{g^2}{r_0^2} \left(\frac{r_0}{r} \right)^n, \quad (100.9)$$

рассмотренного в предыдущей задаче. Вводя обозначения

$$x = \frac{r}{r_0}, \quad y = \frac{r'}{r_0}, \\ z = \frac{r''}{r_0}, \quad \lambda = \frac{n-2}{2}, \quad (100.10)$$

получаем

$$a_1(r) = g^2 r_0 \int_0^x dy y^{2-n} \exp \left\{ -2g^2 \int_y^x z^{1-n} dz \right\} = \\ = g^2 r_0 \int_0^x y^{-2\lambda} \exp \left\{ \frac{g^2}{\lambda} (x^{-2\lambda} - y^{-2\lambda}) \right\} dy.$$

Последнее выражение после замены

$$s = \frac{g^2}{\lambda} x^{-2\lambda} \quad \text{и} \quad t = \frac{g^2}{\lambda} y^{-2\lambda}. \quad (100.11)$$

принимает вид

$$a_1(r) = \frac{1}{2} r_0 \left(\frac{g^2}{\lambda} \right)^{\frac{1}{2\lambda}} e^s \int_s^\infty t^{-\frac{1}{2\lambda}} e^{-t} dt. \quad (100.12)$$

Подставляя его теперь в формулу (100.8), получаем

$$a_2 = \frac{1}{2} r_0 \left(\frac{g^2}{\lambda} \right)^{\frac{1}{2\lambda}} \int_0^\infty ds s^{-\frac{1}{2\lambda}} e^{-s} \left\{ 1 + \frac{1}{4} s^{\frac{1}{\lambda}} e^{2s} \left[\int_0^\infty t^{-\frac{1}{2\lambda}} e^{-t} dt \right]^2 \right\}. \quad (100.13)$$

Если в фигурных скобках оставить только первый член, то это, разумеется, даст нам формулу первого приближения (99.11). Что касается поправки

$$\alpha = \frac{a_2 - a_1}{a_1}, \quad a_2 = a_1(1 + \alpha), \quad (100.14)$$

то для нее из (100.13) легко получается выражение вида

$$\alpha = \frac{1}{4\Gamma\left(1 - \frac{1}{2\lambda}\right)} \int_0^\infty ds s^{\frac{1}{2\lambda}} e^s \left[\int_s^\infty t^{-\frac{1}{2\lambda}} e^{-t} dt \right]^2. \quad (100.15)$$

Этот интеграл сходится, и его в общем случае можно вычислить численным интегрированием.

Имеются два случая, а именно $n=4$ и $n \rightarrow \infty$, когда оценка интеграла особенно проста.

Если $n=4$ или $\lambda=1$, имеем

$$\alpha = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \int_0^\infty ds \sqrt{s} e^s \left[\int_s^\infty \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-t} dt \right]^2,$$

или

$$\alpha = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^\infty \xi^2 e^{\xi^2} (\operatorname{Erfc} \xi)^2 d\xi.$$

Численное интегрирование по методу Симпсона и использование в области $\xi > 2,4$ вместо функции ошибок ее асимптотического выражения приводят к значению $\alpha = 0,0770$. Как мы видели (см. стр. 272), в первом приближении

$$a_1 = 0,886a,$$

когда $n=4$, поэтому во втором приближении получаем

$$a_2 = 0,886 \cdot 1,077a = 0,954a.$$

Таким образом, ошибка, составляющая в первом приближении 11,4%, теперь будет равна 4,6%.

В случае $n \rightarrow \infty$, или $1/\lambda = 0$, сходимость метода несколько хуже. Выражение (100.15) в этом случае дает

$$\alpha = \frac{1}{4} \int_0^{\infty} ds e^s \left[\int_s^{\infty} e^{-t} dt \right]^2 = \frac{1}{4},$$

и так как

$$a_1 = 0,500a,$$

то

$$a_2 = 0,625a.$$

Задача 101. Длина рассеяния для сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямы

В случае сферически симметричной прямоугольной потенциальной ямы

$$U = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) = \begin{cases} -K_0^2, & 0 \leq r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (101.1)$$

сравнить точное выражение для длины рассеяния с приближенным выражением, полученным на основании линеаризованного уравнения Калоджеро. Обсудить также случай сил отталкивания, который получается при перемене знака в формуле (101.1)

Решение. Введем обозначения

$$kR = x, \quad K_0 R = X_0, \quad KR = X = \sqrt{X_0^2 + x^2}. \quad (101.2)$$

В этих обозначениях, согласно задаче 89, мы имеем следующее точное выражение:

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{x - L \operatorname{tg} x}{L + x \operatorname{tg} x}. \quad (101.3)$$

Для потенциала (101.1) логарифмическая производная [см. равенство (89.5)] равна

$$L = X \operatorname{ctg} X. \quad (101.4)$$

Что же касается длины рассеяния, определяемой выражением

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\operatorname{tg} \delta_0}{k}, \quad (101.5)$$

то для нее в рассматриваемом случае [см. также (89.14)] имеет место формула

$$a = -R \lim_{\substack{x \rightarrow 0 \\ X \rightarrow X_0}} \frac{\operatorname{tg} \delta_0}{x} = -R \left(\frac{\operatorname{tg} X_0}{X_0} - 1 \right). \quad (101.6)$$

С другой стороны, линеаризованное уравнение Калоджеро, как мы знаем из задачи 98, приводит к соотношению

$$\operatorname{tg} \tilde{\delta}_0 = -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin^2 kr \exp \left[-\frac{1}{k} \int_r^{\infty} U(r') \sin 2kr' dr' \right],$$

что с учетом определения (101.5) дает

$$\tilde{a} = \int_0^{\infty} dr r^2 U(r) \exp \left[-2 \int_r^{\infty} r' U(r') dr' \right]. \quad (101.7)$$

Отсюда в случае потенциала (101.1) получаем

$$\tilde{a} = -K_0^2 \int_0^R r^2 \exp [K_0^2 (R^2 - r^2)] dr,$$

или

$$\tilde{a} = -R \frac{e^{X_0^2}}{X_0} \int_0^{X_0} t^2 e^{-t^2} dt, \quad (101.8)$$

где мы ввели обозначение

$$t = \frac{X_0 r}{R}.$$

Если воспользоваться тождеством

$$\int_0^{X_0} t^2 e^{-t^2} dt = \frac{1}{2} \int_0^{X_0} e^{-t^2} dt - \frac{1}{2} X_0 e^{-X_0^2},$$

то интеграл в правой части равенства (101.8) можно привести к функции ошибок. Окончательный результат имеет вид

$$\tilde{a} = -\frac{1}{2} R \left\{ \frac{e^{X_0^2}}{X_0} \int_0^{X_0} e^{-t^2} dt - 1 \right\}. \quad (101.9)$$

Длины рассеяния, рассчитанные по точной формуле (101.6) и по приближенной формуле (101.9), для сравнения приведены в нижеприведенной таблице для нескольких значений X_0 :

| X_0 | Притяжение | | Отталкивание | |
|-------|------------|---------------|--------------|---------------|
| | a/R | \tilde{a}/R | a/R | \tilde{a}/R |
| 1,0 | -0,557 | -0,515 | 0,238 | 0,231 |
| 1,2 | -1,142 | -0,912 | 0,305 | 0,289 |
| 1,4 | -3,14 | -1,632 | 0,368 | 0,337 |
| 1,6 | +20,4 | -3,02 | 0,424 | 0,375 |

Ниже точки $X_0 = 0,7$ различие становится совершенно незначительным. С другой стороны, при $X_0 = \pi/2$ точная формула в случае сил притяжения приводит к расходимости и, кроме того, длина рассеяния меняет знак. Эту особенность длины рассеяния наше приближение передать не в состоянии. Таким образом,

линейной аппроксимацией можно пользоваться без опасений только в том случае, когда уровни связанных состояний располагаются заметно ниже нуля.

В случае сил отталкивания, когда потенциал имеет вид

$$U = \begin{cases} K_0^2, & 0 \leq r \leq R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (101.10)$$

мы аналогичным образом для длины рассеяния находим точную формулу

$$a = -R \left(\frac{\text{th } X_0}{X_0} - 1 \right) \quad (101.11)$$

и приближенную формулу

$$\tilde{a} = -\frac{1}{2} R \left\{ \frac{e^{-X_0^2}}{X_0} \int_0^{X_0} e^{t^2} dt - 1 \right\}. \quad (101.12)$$

В случае сил отталкивания резонансные эффекты отсутствуют, поэтому наше приближение, как показывают последние два столбца таблицы, оказывается более удовлетворительным.

Задача 102. Длина рассеяния потенциала Юкавы

Определить длину рассеяния в случае сил притяжения, описываемых потенциалом Юкавы:

$$V(r) = -V_0 \frac{r_0}{r} e^{-r/r_0}, \quad V_0 = \frac{\hbar^2 g}{2m r_0^2}. \quad (102.1)$$

Рассмотреть три метода:

- а) метод линеаризованного уравнения Калоджеро;
- б) метод численного интегрирования уравнения Шредингера при $g = 1$;
- в) Метод Борна.

Решение. И линеаризованное уравнение Калоджеро, и борновское приближение — это методы, типичные для области высоких энергий, поэтому не следует ожидать, что они дадут надежные результаты для длины рассеяния, т. е. в области низких энергий. В задаче 98 было показано, что линеаризованное уравнение Калоджеро лучше второго и тем более лучше первого борновского приближений. Таким образом, данная задача может служить иллюстрацией того, что эти приближения с точки зрения их качества располагаются именно в таком порядке, как указано выше. В этой связи весьма удивительно, что полученные ниже результаты в общих чертах все же передают основные особенности рассеяния даже при нулевой энергии.

а. Воспользовавшись выражением (98.4) для функции $\tilde{t}(r)$ и определением длины рассеяния

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\text{tg } \delta_0}{k} \quad (102.2)$$

и введя обозначения

$$U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) = -\frac{g}{r_0^2} \cdot \frac{e^{-x}}{x}, \quad x = \frac{r}{r_0}, \quad (102.3)$$

мы получим следующую приближенную формулу:

$$\tilde{a} = -gr_0 \int_0^{\infty} x e^{-x} e^{2ge^{-x}} dx. \quad (102.4)$$

Подставив в эту формулу

$$y = 2ge^{-x},$$

найдем

$$\tilde{a} = -\frac{1}{2} r_0 \int_0^{2g} e^y (\ln 2g - \ln y) dy.$$

Вводя интегральную экспоненту

$$\text{Ei } y = \int_{-\infty}^y \frac{1}{t} e^t dt$$

и интегрируя по частям, окончательно получаем

$$\tilde{a} = -\frac{1}{2} r_0 (\text{Ei } 2g - \ln 2g - C), \quad (102.5)$$

где $C = 0,5772 \dots$ — постоянная Эйлера. Числовые результаты для некоторых значений константы взаимодействия g приведены в нижеследующей таблице:

| g | $-\tilde{a}/r_0$ | g | $-\tilde{a}/r_0$ |
|-----|------------------|-----|------------------|
| 0,1 | 0,1052 | 0,9 | 1,5425 |
| 0,2 | 0,2220 | 1,0 | 1,8420 |
| 0,3 | 0,3518 | 1,1 | 2,1835 |
| 0,4 | 0,4967 | 1,2 | 2,5740 |
| 0,5 | 0,6589 | 1,3 | 3,0217 |
| 0,6 | 0,8413 | 1,4 | 3,5362 |
| 0,7 | 1,0468 | 1,5 | 4,1290 |
| 0,8 | 1,2790 | | |

б. Длину рассеяния можно определить, зная решение радиального уравнения Шредингера при нулевой энергии

$$\chi_0'' = -g \frac{e^{-x}}{x} \chi_0, \quad (102.6)$$

которое определяется начальными условиями

$$\chi_0(0) = 0, \quad \chi_0'(0) = 1. \quad (102.7)$$

При очень больших значениях x член, содержащий потенциальную энергию, практически равен нулю, поэтому асимптотическое решение представляет собой линейную функцию:

$$\chi_0 \rightarrow A \left(1 - \frac{x}{\alpha} \right), \quad (102.8)$$

где постоянная α связана с длиной рассеяния a соотношением

$$\alpha = \frac{a}{r_0}. \quad (102.9)$$

Разрешая асимптотическое равенство (102.8) относительно α , получаем

$$-\alpha = \frac{\chi_0(x)}{\chi_0'(x)} - x. \quad (102.10)$$

Ниже в таблице приведены интересующие нас величины, полученные численным интегрированием уравнения (102.6) при начальных условиях (102.7) для случая $g=1$.

| x | χ | χ' | $-\alpha$ |
|-----|--------|---------|-----------|
| 0 | 0 | 1 | 0 |
| 1 | 0,638 | 0,457 | 0,348 |
| 2 | 1,040 | 0,298 | 1,484 |
| 3 | 1,312 | 0,255 | 2,15 |
| 4 | 1,559 | 0,241 | 2,47 |
| 5 | 1,798 | 0,237 | 2,60 |
| 5,5 | 1,916 | 0,236 | 2,63 |
| 6 | 2,033 | 0,235 | 2,65 |

Из таблицы видно, что величина α , рассчитанная по формуле (102.10), при $x=0$ равна нулю, а затем с ростом x медленно возрастает, стремясь к некоему постоянному пределу, который и определяет длину рассеяния. В нашем примере имеем

$$a = -2,65r_0. \quad (102.11a)$$

Это значение следует сравнить с приближенным значением (102.5),

которое при $g = 1$ равно

$$\bar{a} = -1,842r_0. \quad (102.116)$$

в. Формулу первого борновского приближения можно получить из формулы (102.4), если оставить там только член, линейный по g . Таким образом, имеем

$$a_1 = -gr_0 \int_0^{\infty} xe^{-x} dx = -gr_0,$$

что в случае $g = 1$ дает

$$a_1 = -r_0. \quad (102.11в)$$

Если же в разложении подынтегрального выражения в (102.4) мы учтем еще и член, квадратичный по g , то в результате у нас получится формула второго борновского приближения:

$$a_2 = -gr_0 \int_0^{\infty} xe^{-x} (1 + 2ge^{-x}) dx = -gr_0 \left(1 + \frac{1}{2}g\right).$$

Отсюда для случая $g = 1$ находим

$$a_2 = -1,500r_0. \quad (102.11г)$$

В заключение заметим, что чем сильнее взаимодействие, тем, разумеется, больше отклоняются от точного все три рассмотренные нами приближенные значения. Классификация этих приближений в качественном отношении вполне соответствует той, которая предсказывалась нами в самом начале задачи.

Литература к задачам 96—102

- Calogero F.*, Nuovo Cimento, 27, 261, (1963).
Klar H., Krüger H., Zs. Rhys., 191, 409 (1966).
Krüger H., Zs. Rhys., 204, 114; 205, 338 (1967).

Задача 103. Улучшение сходимости рядов сферических гармоник

Используя рекуррентные соотношения, связывающие соседние полиномы Лежандра, получить вместо ряда

$$f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l P_l(x) \quad (103.1)$$

более быстро сходящийся ряд для функции $(1-x)f(x)$.

Решение. Чтобы получить интересующий нас ряд, мы можем воспользоваться рекуррентным соотношением

$$(l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x) = (2l+1)xP_l(x). \quad (103.2)$$

Это дает

$$(1-x)f(x) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l \left(P_l - \frac{l+1}{2l+1} P_{l+1} - \frac{l}{2l+1} P_{l-1} \right).$$

Выделяя здесь первое слагаемое и переобозначая индекс суммирования, находим

$$(1-x)f(x) = f_0 - \frac{1}{3} f_1 + \sum_{l=1}^{\infty} \tilde{f}_l P_l(x), \quad (103.3)$$

где

$$\tilde{f}_l = f_l - \frac{l}{2l-1} f_{l-1} - \frac{l+1}{2l+3} f_{l+1}. \quad (103.4)$$

Теперь, чтобы получить представление о достигнутом улучшении сходимости, положим для больших l

$$f_l = Cl^{-\kappa}.$$

Тогда выражение

$$\begin{aligned} \tilde{f}_l &= C \left\{ l^{-\kappa} - \frac{l}{2l-1} (l-1)^{-\kappa} - \frac{l+1}{2l+3} (l+1)^{-\kappa} \right\} = \\ &= Cl^{-\kappa} \left\{ 1 - \frac{l}{2l-1} \left(\frac{l}{l-1} \right)^{\kappa} - \frac{l+1}{2l+3} \left(\frac{l}{l+1} \right)^{\kappa} \right\} \end{aligned}$$

при $l \gg 1$ можно разложить следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_l = f_l \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2l} \right)^{-1} \left(1 - \frac{1}{l} \right)^{-\kappa} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{l} \right) \left(1 + \frac{3}{2l} \right)^{-1} \left(1 + \frac{1}{l} \right)^{-\kappa} \right\}. \end{aligned}$$

Члены, содержащие l^0 и l^{-1} , взаимно сокращаются, так что основной член разложения становится равным

$$\tilde{f}_l = -f_l \frac{(\kappa+1)^2}{2l^2},$$

и мы, действительно, имеем значительное улучшение сходимости.

Замечание. Приведенные формулы еще больше упрощаются, если положить

$$f_l = (2l+1) \alpha_l,$$

как это чаще всего и бывает в приложениях. В этом случае получается формула

$$(1-x)f(x) = \alpha_0 - \alpha_1 + \sum_{l=1}^{\infty} \{ (2l+1) \alpha_l - l \alpha_{l-1} - (l+1) \alpha_{l+1} \} P_l(x).$$

Литература

Yennie D. R., Ravenhall D. G., Wilson R. N., Phys. Rev., 95, 500 (1954).

Задача 104. Интеграл по прицельному расстоянию

Когда $kR \gg 1$, где R — эффективный размер области взаимодействия, основной вклад в амплитуду рассеяния дают состояния с $l \gg 1$. Заменяя сумму по l интегралом по прицельному расстоянию b и взяв для фазы рассеяния $\delta(b)$ выражение, полученное методом ВКБ, определите сечение рассеяния.

Решение. В общую формулу амплитуды рассеяния

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta) \quad (104.1)$$

введем прицельное расстояние

$$b = \frac{l + \frac{1}{2}}{k} \quad (104.2)$$

и используем его в качестве переменной интегрирования:

$$f(\vartheta) = -ik \int_0^{\infty} b [e^{2i\delta(b)} - 1] P_l(\cos \vartheta) db. \quad (104.3)$$

Замена нижнего предела интегрирования $1/(2k) \ll R$ нулем в данном случае вполне допустима. Несколько труднее представить полином Лежандра P_l в виде функции прицельного расстояния b . По определению полиномы Лежандра связаны с гипергеометрической функцией соотношением

$$P_l(\cos \vartheta) = {}_2F_1\left(l+1, -l, 1; \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right), \quad (104.4a)$$

или подробнее

$$P_l(\cos \vartheta) = 1 - \frac{l(l+1)}{1^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} + \frac{(l-1)l(l+1)(l+2)}{2!^2} \sin^4 \frac{\vartheta}{2} + \dots \quad (104.4b)$$

Отсюда нетрудно получить асимптотическое выражение для значений $l \gg 1$. Введем обозначение

$$\lambda = l + \frac{1}{2}, \quad (104.5)$$

тогда, очевидно,

$$\begin{aligned} l(l+1) &= \lambda^2 - \frac{1}{4}, \\ (l-1)(l+2) &= \lambda^2 - \frac{9}{4}, \\ (l-n)(l+n+1) &= \lambda^2 - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \end{aligned}$$

и, следовательно, коэффициенты ряда (104.4б) отличаются от λ^{2n} лишь членами порядка λ^{-2} . Если пренебречь этими поправками в случае больших l , то равенство (104.4б) можно записать в виде

$$P_l(\cos \vartheta) = 1 - \frac{\lambda^2}{11^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} + \frac{\lambda^4}{21^2} \sin^4 \frac{\vartheta}{2} + \dots,$$

но последний ряд, как известно, представляет функцию Бесселя, поэтому окончательно получаем

$$\lim_{l \rightarrow \infty} P_l(\cos \vartheta) = J_0 \left((2l+1) \sin \frac{\vartheta}{2} \right). \quad (104.6)$$

Подставляя выражение (104.6) в формулу (104.3) и учитывая соотношение (104.2), находим

$$f(\vartheta) = -ik \int_0^{\infty} b [e^{2i\delta(b)} - 1] J_0 \left(2kb \sin \frac{\vartheta}{2} \right) db. \quad (104.7)$$

Так как энергия рассеиваемой частицы велика, то мы можем для вычисления фазы рассеяния $\delta(b)$ применить приближение ВКБ, воспользовавшись методом квазипотенциала, развитым в задаче 124. Согласно равенству (124.7), имеем

$$\delta(b) = -\frac{1}{2} k \int_b^{\infty} \frac{t}{\sqrt{t^2 - b^2}} \frac{Q(t)}{E} dt,$$

где функцию $Q(t)$ в области высоких энергий, а точнее, при условии

$$|V(r)| \ll E$$

для всех значений r , можно заменить потенциалом $V(r)$. Если теперь от переменной t вернуться к переменной r , то у нас получится следующее простое соотношение:

$$\delta(b) = -\frac{k}{2E} \int_b^{\infty} \frac{rV(r) dr}{\sqrt{r^2 - b^2}}. \quad (104.8)$$

Стоит заметить, что это соотношение линейно по потенциалу $V(r)$, поэтому, когда потенциал состоит из отдельных простых слагаемых, как, например, межмолекулярный потенциал Леннарда — Джонса, содержащий две отрицательные степени r и т. п., их вклады в фазу рассеяния просто суммируются.

В заключение запишем формулу для полного сечения рассеяния, применив к соотношению (104.7) оптическую теорему

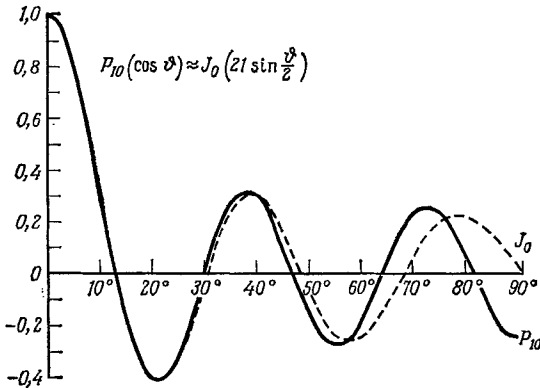
$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0).$$

Это даст

$$\sigma = 4\pi \int_0^{\infty} b [1 - \cos 2\delta(b)] db. \quad (104.9)$$

Замечание. Аппроксимация (104.6) очень удобна в задачах рассеяния в тех случаях, когда энергия велика. Она значительно лучше известного асимптотического выражения

$$P_l(\cos \vartheta) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi l \sin \vartheta}} \cos \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \vartheta - \frac{\pi}{4} \right], \quad (104.6a)$$



Фиг. 55. Полином Лежандра $P_{10}(\cos \vartheta)$ (сплошная линия) и аппроксимирующая его функция Бесселя (104.6) (пунктирная линия).

которое имеет особенности в точках $\vartheta = 0$ и $\vartheta = \pi$. Вблизи $\vartheta = 0$ (рассеяние вперед, представляющее наибольший интерес) равенство (104.6) является почти точным. По мере роста угла ϑ точность приближения ухудшается, и в точке $\vartheta = \pi$ мы получаем $J_0(2l + 1)$ вместо нужного значения $(-1)^l$. На фиг. 55 для сравнения изображены полином P_{10} и аппроксимирующая его функция (104.6). Так как с ростом энергии ($kR \gg 1$) рассеяние назад становится все менее существенным, то эта ошибка нашей аппроксимации не играет сколько-нибудь заметной роли.

Литература

- Molière G., Zs. Naturforsch., 2a, 133 (1947).
 Blankenbecler R., Goldberger M. L., Phys. Rev., 126, 766 (1962).
 Flügge S., Krüger H., Zs. Phys., 216, 213 (1968).

Задача 105. Борновское рассеяние. Последовательные приближения.

Решить задачу о потенциальном рассеянии, рассматривая рассеивающий потенциал в качестве малого возмущения. Разобрать более подробно случай центральных сил.

Решение. Запишем уравнение Шредингера в виде

$$\nabla^2 u + k^2 u = gW(\mathbf{r})u, \quad (105.1)$$

где

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad gW(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}). \quad (105.2)$$

Функция Грина, соответствующая оператору, стоящему в левой части уравнения (105.1), имеет вид

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (105.3)$$

Рассматривая формально правую часть уравнения (105.1) в качестве неоднородности, мы можем применить к нему стандартный метод решения неоднородных дифференциальных уравнений. Таким образом, имеем

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + g \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') W(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}') d^3 r', \quad (105.4)$$

где $u_0(\mathbf{r})$ — решение однородного уравнения. Равенство (105.4) представляет собой интегральное уравнение для функции $u(\mathbf{r})$.

Нетрудно убедиться, что интегральный член в (105.4) асимптотически, при больших r , описывает расходящуюся сферическую волну. Действительно, с ростом r' потенциал достаточно быстро убывает, что практически делает область интегрирования конечной, поэтому в выражении для функции Грина (105.3) мы можем считать, что $r \gg r'$ и, следовательно,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-ikr' \cos \theta'}, \quad (105.5)$$

где θ' означает угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' . В задачах рассеяния в качестве решения однородного уравнения $u_0(\mathbf{r})$ следует брать плоскую волну, описывающую пучок падающих частиц. Пользуясь стандартной нормировкой, запишем ее в виде

$$u_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}; \quad |\mathbf{k}_0| = k. \quad (105.6)$$

Решение уравнения (105.4) можно получить методом последовательных приближений:

$$u_n(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + g \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') W(\mathbf{r}') u_{n-1}(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (105.7)$$

Другими словами, его можно записать в виде ряда Неймана:

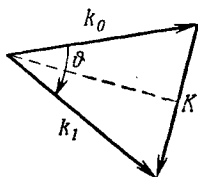
$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + g \int d^3 r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') W(\mathbf{r}') \{u_0(\mathbf{r}') + \\ + g \int G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'') W(\mathbf{r}'') [u_0(\mathbf{r}'') + \dots] d^3 r''\}.$$

Последний представляет собой ряд по степеням „константы взаимодействия“ g . Для нахождения n -го приближения необходимо вычислять $3n$ -кратный интеграл, что делает расчет всех членов, кроме первого, весьма громоздким.

Формула первого Борновского приближения заметно упрощается в том случае, когда потенциал $W(\mathbf{r})$ зависит только от модуля вектора \mathbf{r} . В этом случае асимптотическое поведение функции $u_1(\mathbf{r})$, согласно формулам (105.7), (105.6) и (105.5), будет описываться равенством

$$u_1(\mathbf{r}) = e^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} - \frac{g e^{ikr}}{4\pi r} \int e^{-ikr' \cos \Theta'} W(r') e^{ik_0 \cdot \mathbf{r}'} d^3 r'. \quad (105.8)$$

Введем вектор \mathbf{k}_1 , совпадающий по направлению с вектором \mathbf{r} и такой, что $|\mathbf{k}_1| = k$. Тогда



$$kr' \cos \Theta' = (\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}')$$

и интеграл (105.8) принимает вид

$$\int_0^\infty dr' r'^2 \oint e^{i(k_0 - k_1) \cdot \mathbf{r}'} W(r') d\Omega'. \quad (105.9)$$

Фиг. 56. Волновые векторы и угол рассеяния.

Вектор

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0 \quad (105.10)$$

представляет собой импульс (в единицах \hbar), переданный частице, рассеянной в направлении вектора \mathbf{r} . Обозначив посредством ϑ угол рассеяния, т. е. угол между векторами \mathbf{k}_0 и \mathbf{r} , мы можем написать (фиг. 56)

$$K = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (105.11)$$

Выполняя в выражении (105.9) интегрирование по углам, получаем

$$\oint e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} d\Omega' = 4\pi \frac{\sin Kr'}{Kr'}, \quad (105.12)$$

так что формула первого приближения (105.8) окончательно приобретает вид

$$u_1(\mathbf{r}) = e^{ik_0 \cdot \mathbf{r}} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (105.13)$$

где

$$f(\vartheta) = -g \int_0^\infty r'^2 W(r') \frac{\sin Kr'}{Kr'} dr'. \quad (105.14)$$

Амплитуда рассеяния $f(\vartheta)$ простым образом связана с дифференциальным сечением рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2. \quad (105.15)$$

Формулой (105.14) для амплитуды рассеяния, разумеется, нельзя пользоваться, если интеграл расходится на верхнем или на нижнем пределе. Следовательно, в окрестности точки $r' = 0$

потенциал должен расходиться не сильнее, чем $r'^{-3+\varepsilon}$ ($\varepsilon > 0$). С другой стороны, при больших r' он должен убывать быстрее кулоновского потенциала, т. е. по крайней мере как $r'^{-1-\varepsilon}$.

Задача 106. Рассеяние на потенциале Юкавы

В первом борновском приближении найти амплитуду рассеяния в случае сил притяжения, описываемых потенциалом Юкавы:

$$V(r) = -V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r}, \quad \alpha = \frac{1}{r_0}. \quad (106.1)$$

Оценить качество приближения, используя разложение по парциальным волнам.

Решение. В первом борновском приближении имеем

$$f(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr, \quad (106.2)$$

$$K = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Применительно к потенциалу (106.1) элементарное интегрирование дает

$$f(\vartheta) = Pr_0 \frac{1}{1 + K^2 r_0^2}, \quad (106.3)$$

где постоянная

$$P = \frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2} \quad (106.4)$$

характеризует „размер“ потенциальной ямы.

С другой стороны, разлагая амплитуду рассеяния по парциальным волнам, имеем

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta). \quad (106.5)$$

Чтобы оценить качество первого борновского приближения (106.3) с помощью фаз рассеяния δ_l , мы должны либо разложить выражение (106.3) по сферическим гармоникам, либо произвести это разложение непосредственно в формуле (106.2) и лишь затем перейти к частному случаю потенциала Юкавы. Разумеется, оба пути ведут к одному и тому же конечному результату.

1. Разложение амплитуды рассеяния (106.3) по парциальным волнам имеет вид

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} P_l(\cos \vartheta) = \frac{Px_0}{1 + 2x_0^2(1 - \cos \vartheta)},$$

где

$$x_0 = kr_0. \quad (106.6)$$

Пользуясь ортогональностью сферических гармоник, получаем

$$\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2i} = \frac{P}{4x_0} \int_{-1}^1 \frac{P_l(t) dt}{t_0 - t}, \quad (106.7)$$

$$t_0 = 1 + \frac{1}{2x_0^2}.$$

Фигурирующие здесь интегралы

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{P_l(t) dt}{t_0 - t} = Q_l(t_0) \quad (106.8)$$

определяют функции Лежандра второго рода ($t_0 > 1$). Две первые из них имеют вид

$$Q_0(t_0) = \frac{1}{2} \ln \frac{t_0 + 1}{t_0 - 1},$$

$$Q_1(t_0) = \frac{1}{2} t_0 \ln \frac{t_0 + 1}{t_0 - 1} - 1.$$

Заменяя здесь переменную t_0 переменной x_0 , окончательно получаем

$$\delta_l \approx \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l} - 1) = P\varphi_l(x_0), \quad (106.9)$$

причем

$$\varphi_0(x_0) = \frac{1}{4x_0} \ln(1 + 4x_0^2),$$

$$\varphi_1(x_0) = \frac{1}{4x_0} \left\{ \left(1 + \frac{1}{2x_0^2}\right) \ln(1 + 4x_0^2) - 2 \right\}.$$

2. Чтобы разложить амплитуду рассеяния (106.2), воспользуемся тождеством

$$\frac{\sin Kr}{Kr} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l^2(kr) P_l(\cos \vartheta). \quad (106.10)$$

Сравнивая теперь выражения (106.2) и (106.5), получаем соотношение

$$\delta_l \approx \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l} - 1) = -\frac{2m}{\hbar^2} k \int_0^{\infty} r^2 V(r) j_l^2(kr) dr. \quad (106.11)$$

Если подставить сюда вместо $V(r)$ выражение для потенциала Юкавы (106.1) и ввести обозначения

$$kr = z \text{ и } a = \frac{\alpha}{k} = \frac{1}{kr_0} = \frac{1}{x_0},$$

то это соотношение примет вид

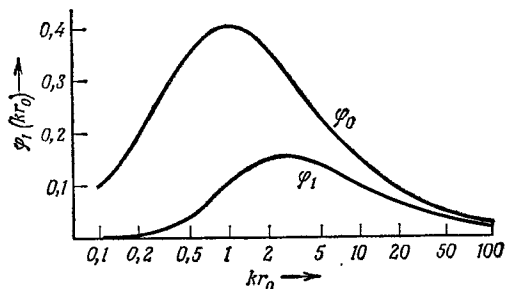
$$\frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{V_0}{Ea} \int_0^{\infty} z e^{-az} j_l^2(z) dz.$$

С помощью известной формулы

$$j_l^2(z) = \frac{2z^l}{l!} \int_0^{\pi/2} j_l(2z \sin \vartheta) \sin^{l+1} \vartheta \cos^{2l+1} \vartheta d\vartheta \quad (106.12)$$

интеграл (106.11) можно преобразовать таким образом, чтобы функция Бесселя входила в подынтегральное выражение линейно. Учитывая далее, что

$$\int_0^{\infty} z^{l+1} j_l(bz) e^{-az} dz = \frac{(2b)^l l!}{(a^2 + b^2)^{l+1}}, \quad (106.13)$$



Фиг. 57. Первое приближение для фаз рассеяния на потенциале Юкавы $\delta_l = -P\varphi_l(kr_0)$. P — параметр, характеризующий размер ямы. По оси абсцисс отложен энергетический параметр в логарифмическом масштабе.

окончательно получаем

$$\delta_l \approx \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{P}{2x_0} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^{2l+1} \vartheta \cos^{2l+1} \vartheta}{(\sin^2 \vartheta + \beta^2)^{l+1}} d\vartheta. \quad (106.14)$$

С помощью замены переменной интегрирования

$$t = \sin^2 \vartheta + \beta^2$$

последний интеграл приводится к более простому виду

$$\frac{1}{2} \int_{\beta^2}^{1+\beta^2} \frac{(t-\beta^2)^l (1+\beta^2-t)^l}{t^{l+1}} dt \quad (106.15)$$

и его можно вычислить для каждого значения l . В результате, разумеется, снова получается найденная выше формула (106.9).

Чтобы можно было судить о качестве сделанного приближения, на фиг. 57 изображены графики функций $\varphi_0(x_0)$ и $\varphi_1(x_0)$

(по оси абсцисс отложена переменная x_0 в логарифмическом масштабе). При $x_0 = 0$ обе функции обращаются в нуль и при малых энергиях они ведут себя соответственно как

$$\begin{aligned}\varphi_0(x_0) &= x_0(1 - 2x_0^2 + \dots), \\ \varphi_1(x_0) &= \frac{2}{3}x_0(1 - 4x_0^2 + \dots).\end{aligned}\quad (106.16)$$

Далее обе они проходят через максимум и при больших энергиях снова стремятся к нулю. Борновское приближение оказывается хорошим в том случае, если для интересующего нас значения энергии выполняются неравенства

$$P\varphi_0 \ll 1 \text{ и } kr_0 \gg 1.$$

Может случиться, что произведение $P\varphi_0$ не очень мало по сравнению с единицей, но все еще имеет место неравенство $P\varphi_1 \ll 1$, в таком случае можно написать

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_{0B}}) + f_B(\vartheta), \quad (106.17)$$

где индексом B отмечены амплитуда и фаза рассеяния в борновском приближении, определяемые равенствами (106.3) и (106.9). Точный расчет здесь требуется только для определения фазы $\delta_0(l=0)$, остальная же часть амплитуды $f(\vartheta)$, т. е. $f_B(\vartheta)$, находится по формуле (106.3).

Замечание. В первом борновском приближении и амплитуда рассеяния (106.3) и выражение (106.9) для функции δ_l

$$\frac{1}{2i}(e^{2i\delta_l} - 1) = e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

оказываются действительными. Это возможно лишь в том случае, когда истинная фаза рассеяния удовлетворяет условию $|\delta_l| \ll 1$, поскольку разложение интересующего нас выражения в ряд по степеням δ_l имеет вид

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l = \delta_l + i\delta_l^2 + \dots$$

Вообще говоря, достаточным является даже условие $\delta_l^2 \ll 1$, так как в полное сечение рассеяния

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

входит только

$$\sin^2 \delta_l = \delta_l^2 - \frac{1}{3} \delta_l^4 + \dots$$

Задача 107. Рассеяние на экспоненциальном потенциале

В первом борновском приближении определить амплитуду рассеяния на потенциале вида

$$V(r) = -V_0 e^{-r/r_0}. \quad (107.1)$$

В этом же приближении найти фазы рассеяния δ_0 и δ_1 , обусловленные вкладом состояний с $l=0$ и $l=1$. С помощью метода,

развитого в задаче 96, вычислить фазу рассеяния δ_0 во втором борновском приближении и результат расчета сравнить с полученным ранее.

Решение. В первом борновском приближении амплитуда рассеяния имеет следующий вид:

$$f(\vartheta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} r^2 V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr, \quad (107.2)$$

$$K = 2k \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Вводя безразмерные величины

$$P = \frac{2mV_0 r_0^2}{\hbar^2}, \quad x_0 = kr_0, \quad (107.3)$$

и используя в качестве переменной интегрирования величину $x = r/r_0$, амплитуде рассеяния можно придать следующую форму:

$$f(\vartheta) = \frac{P}{K} \int_0^{\infty} x e^{-x} \sin qx dx, \quad q = 2x_0 \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (107.4)$$

Последний интеграл вычисляется элементарно, и окончательный результат имеет вид

$$f(\vartheta) = \frac{P}{K} \frac{2q}{(1+q^2)^2},$$

или

$$f(\vartheta) = \frac{2Pr_0}{(a-b \cos \vartheta)^2}, \quad (107.5)$$

$$a = 1 + 2x_0^2, \quad b = 2x_0^2.$$

Для амплитуды такого вида нетрудно рассчитать и полное сечение рассеяния:

$$\sigma = \oint |f(\vartheta)|^2 d\Omega = 4\pi \cdot 2P^2 r_0^2 \int_{-1}^1 \frac{d(\cos \vartheta)}{(a-b \cos \vartheta)^4}.$$

Этот интеграл также вычисляется элементарно, и в результате получаем

$$\sigma = \frac{32\pi}{3} P^2 r_0^2 \frac{1+2x_0^2}{(1+4x_0^2)^2}. \quad (107.6)$$

Наше приближение, разумеется, не улавливает ни резонансных эффектов, ни зависимости от знака величины P (случай притяжения и случай отталкивания). Так как формула (107.6) относится к области высоких энергий, то $x_0^2 \gg 1$ и ее можно еще более упростить:

$$\sigma = \frac{4\pi}{3} P^2 r_0^2 \cdot \frac{1}{x_0^2} = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{P^2}{k^2}.$$

Мы видим, что с ростом энергии E сечение убывает как $1/E$. Перейдем теперь к вычислению фаз рассеяния δ_l в первом борновском приближении. Как мы знаем, имеет место разложение

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta) \quad (107.7)$$

и, следовательно,

$$\frac{1}{2i} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{k}{2} \int_{-1}^1 f(\vartheta) P_l(\cos \vartheta) d(\cos \vartheta). \quad (107.8)$$

Подставляя сюда вместо $f(\vartheta)$ выражение (107.5), мы после несложных вычислений, в частности, получаем

$$\frac{1}{2i} (e^{2i\delta_0} - 1) = P \frac{2x_0}{1+4x_0^2} \quad (107.9)$$

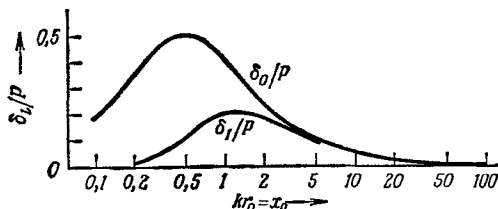
и

$$\frac{1}{2i} (e^{2i\delta_1} - 1) = P \left\{ \frac{1+2x_0^2}{x_0(1+4x_0^2)} - \frac{1}{4x_0^3} \ln(1+4x_0^2) \right\}. \quad (107.10)$$

Левые части этих равенств можно записать в виде

$$e^{i\delta_l} \sin \delta_l,$$

причем последнее выражение можно заменить на δ_l , если фаза рассеяния мала. Зависимость фаз рассеяния δ_0 и δ_1 , измеренных в единицах P , от величины x_0 показана на фиг. 58. На фигуре



Фиг. 58. Борновские фазы рассеяния δ_0 и δ_1 на экспоненциальном потенциале. P — параметр, характеризующий размер ямы. По оси абсцисс отложен энергетический параметр в логарифмическом масштабе.

отчетливо видно, что для небольших значений величины x_0 выполняется условие $\delta_1 \ll \delta_0$, которое означает, что p -рассеянием можно пренебречь по сравнению с s -рассеянием. Интересно, что эта типичная для области малых энергий особенность рассеяния правильно отражается борновским приближением, специально приспособленным к области высоких энергий. Если $x_0 \gg 1$, то обе фазы рассеяния δ_0 и δ_1 оказываются величинами одного порядка и преобладающим становится рассеяние вперед.

Чтобы иметь представление о границах применимости первого борновского приближения, мы с помощью формулы (96.12а) вычис-

лим фазу рассеяния δ_0 во втором борновском приближении. Согласно (96.12а), имеем

$$\operatorname{tg} \delta_0 = -\frac{1}{k} \int_0^{\infty} dr U(r) \sin^2 kr \left\{ 1 - \frac{1}{k} \int_0^{\infty} U(r') \sin 2kr' dr' \right\}, \quad (107.11)$$

где

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r).$$

Для потенциала (107.1) с учетом равенств (107.3) отсюда получается

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{P}{x_0} \int_0^{\infty} dx e^{-x} \sin^2(x_0 x) \left\{ 1 + \frac{P}{x_0} \int_x^{\infty} e^{-y} \sin 2x_0 y dy \right\};$$

выше мы воспользовались безразмерными величинами $x = r/r_0$ и $y = r'/r_0$ в качестве переменных интегрирования. Внутренний интеграл легко вычисляется:

$$\int_x^{\infty} e^{-y} \sin 2x_0 y dy = \frac{e^{-x}}{1+4x_0^2} \left\{ \sin 2x_0 x + 2x_0 \cos 2x_0 x \right\}.$$

Чтобы найти оставшийся интеграл, тригонометрические функции удобно заменить экспонентами. Дальнейшие выкладки совершенно тривиальны, хотя и несколько громоздки. Окончательный результат имеет вид

$$\operatorname{tg} \delta_0 = P \cdot \frac{2x_0}{1+4x_0^2} \left\{ 1 + P \frac{5-4x_0^2}{8(1+x_0^2)(1+4x_0^2)} \right\}. \quad (107.12)$$

Первый член здесь идентичен выражению (107.9), и если второй член в фигурных скобках мал по сравнению с единицей, то можно рассчитывать на хорошую сходимость борновского метода. Таким образом, границы его применимости определяются условием

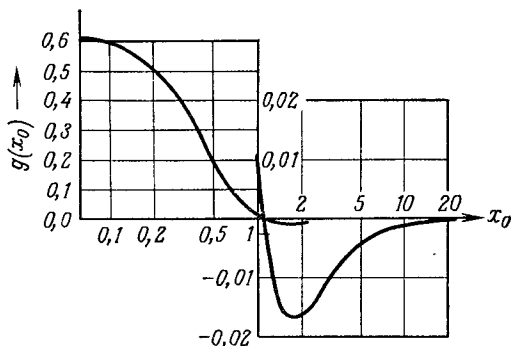
$$|P \cdot g(x_0)| = \left| P \cdot \frac{5-4x_0^2}{8(1+x_0^2)(1+4x_0^2)} \right| \ll 1.$$

График функции $g(x_0)$ изображен на фиг. 59, причем в левой и правой половинах фигуры для удобства использованы различные масштабы.

Числовой пример. Пусть параметр P , характеризующий размер потенциальной ямы, равен 3, и пусть ошибка в амплитуде не превышает 2% (для интенсивности это составляет 4%). Тогда условие применимости первого борновского приближения принимает вид

$$|Pg(x_0)| < 0,02 \text{ или } |g(x_0)| < 0,0067.$$

Граничное значение достигается в точке $x_0 = 4$, чем и определяется наименьшее значение энергии, для которой мы еще можем пользоваться первым борновским приближением. С помощью фиг. 58 нетрудно установить, что для этого значения энергии фаза рассеяния δ_0 оказывается примерно равной 21° .



Фиг. 59. График функции $g(x_0)$.

Чтобы первое борновское приближение было хорошим, функция $|Pg|$ должна быть мала.

Задача 108. Борновское приближение для рассеяния на сферически симметричном распределении заряда

В первом борновском приближении вычислить дифференциальное сечение рассеяния электронов на ядрах, считая, что плотность электрического заряда ядра $\rho(r)$ сферически симметрична. Полученные результаты применить к случаю, когда заряд распределен по объему ядра с постоянной плотностью.

Решение. Если рассеиваемой частицей является электрон с зарядом $-e$, то уравнение Пуассона классической электростатики, связывающее потенциал $V(r)$ и плотность $\rho(r)$, можно записать в виде

$$\nabla^2 V \equiv \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rV) = 4\pi e \rho(r). \quad (108.1)$$

Плотность заряда ядра положительна и нормирована в соответствии с условием

$$4\pi \int_0^\infty r^2 \rho(r) dr = Ze. \quad (108.2)$$

В первом борновском приближении амплитуда рассеяния $f(\theta)$ определяется формулой

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr, \quad (108.3)$$

$$K = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Необходимо отметить, что вне ядра

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r},$$

и поэтому интеграл при бесконечном верхнем пределе, строго говоря, не имеет смысла. Указанная трудность легко устраняется, если в подынтегральное выражение ввести обрезающий множитель $e^{-\alpha r}$, а затем в окончательном результате положить $\alpha = 0$; это впервые было показано Вентцелем¹⁾. Физическим основанием этой несколько сомнительной математической процедуры может служить экранирующее действие атомных электронов.

Рассмотрим тождество, полученное двукратным интегрированием по частям:

$$\int_0^{\infty} (rV) e^{iKr} dr = \frac{1}{iK} \left[e^{iKr} \left(rV - \frac{1}{iK} (rV)' \right) \right]_0^{\infty} - \frac{1}{K^2} \int_0^{\infty} (rV)'' e^{iKr} dr.$$

Благодаря математическому трюку Вентцеля подстановка на верхнем пределе обращается в нуль. В окрестности точки $r=0$ функция $V(r)$ должна иметь вид

$$V = V_0 - V_1 r^2 + \dots,$$

поэтому $rV \rightarrow 0$ и $(rV)' \rightarrow V_0$. Следовательно, вклад от подстановки будет равен $-V_0/K^2$. Но точно такой же вклад даст подстановка и в интеграл, комплексно сопряженный с только что рассмотренным, поэтому в разности этих интегралов, которая равна интегралу, фигурирующему в формуле (108.3), вклада от подстановки содержать не будет. Что касается интегрального члена, то в нем производную $(rV)''$ можно заменить правой частью уравнения (108.1). Это даст

$$f(\vartheta) = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot \frac{4\pi e}{K^3} \int_0^{\infty} r\rho(r) \sin Kr dr. \quad (108.4)$$

Здесь уже никаких трудностей с расходимостью не возникает.

Если бы ядро можно было рассматривать как точечное, то вклад в интеграл происходил бы от малой окрестности точки $r=0$ и мы могли бы воспользоваться непосредственно формулой (108.2), поэтому амплитуда рассеяния $f(\vartheta)$ в этом случае была бы равна

$$f_0(\vartheta) = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 K^2} = \frac{mZe^2}{2\hbar^2 k^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (108.5)$$

Учитывая, что

$$\hbar k = mv \quad \text{и} \quad \frac{1}{2} mv^2 = E,$$

¹⁾ Wentzel G., Zs. Phys., 40, 590 (1927).

последнее выражение можно записать в виде

$$f_0(\vartheta) = \frac{Ze^2}{4E \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}.$$

Отсюда для дифференциального сечения рассеяния получается известная формула Резерфорда

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = |f_0(\vartheta)|^2 = \left(\frac{Ze^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (108.6)$$

Выражению (108.4) можно придать иную форму:

$$f(\vartheta) = f_0(\vartheta) F(K), \quad (108.7)$$

где *формфактор*

$$F(K) = \frac{4\pi}{Ze} \int_0^{\infty} r^2 \rho(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr. \quad (108.8)$$

Он характеризует отклонение сечения рассеяния от резерфордовского:

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_0} = F^2(K). \quad (108.9)$$

В качестве простейшего примера рассмотрим случай, когда заряд ядра распределен с постоянной плотностью внутри сферы радиусом R . Для такого распределения условие нормировки (108.2) и формфактор соответственно имеют вид

$$\frac{4\pi}{3} \rho R^3 = Ze$$

и

$$F = \frac{3}{R^3} \int_0^R r^2 \frac{\sin Kr}{Kr} dr = \frac{3}{(KR)^3} \{\sin KR - KR \cos KR\}, \quad (108.10)$$

или

$$F = \frac{3J_1\left(2kR \sin \frac{\vartheta}{2}\right)}{4k^2 R^2 \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (108.11)$$

При изменении угла в интервале $0 \leq \vartheta \leq \pi$ аргумент сферической функции Бесселя меняется от 0 до $2kR$. Если учесть, что для применимости борновского приближения должно выполняться неравенство $kR \gg 1$, то указанный интервал оказывается довольно большим и функция Бесселя должна в нем иметь несколько нулей. Таким образом, вместо монотонно убывающего с ростом угла резерфордовского сечения рассеяния мы теперь будем иметь последовательность дифракционных максимумов, так же как это бывает в аналогичных задачах классической оптики. Число мак-

симумов при условии, что все они разрешимы, позволяет получить грубое представление о размере ядра.

Замечание. Если считать, что потенциальная энергия нейтрона в поле, созданном другим нуклоном, приближенно описывается потенциалом Юкавы

$$V(r) = -\frac{g^2}{r} e^{-\kappa r}, \quad (108.12)$$

то для описания взаимодействия нейтрона с ядром, плотность частиц в котором равна ρ , можно написать дифференциальное уравнение, аналогичное уравнению Пуассона:

$$\frac{d^2}{dr^2} (rV) - \kappa^2 (rV) = 4\pi g^2 \rho(r) r. \quad (108.13)$$

Условие нормировки теперь имеет вид

$$4\pi \int_0^{\infty} r^2 \rho(r) dr = A, \quad (108.14)$$

где A — атомный вес ядра. В математическом трюке Вентцеля в данном случае нет необходимости, и без него интегрирование по частям дает

$$\int_0^{\infty} (rV) \sin Kr dr = -\frac{1}{K^2} \int_0^{\infty} (rV)'' \sin Kr dr.$$

Если воспользоваться уравнением (108.13), то последнюю формулу можно записать в виде

$$\int_0^{\infty} (rV) \sin Kr dr = -\frac{1}{K^2} \int_0^{\infty} \{4\pi g^2 \rho r + \kappa^2 (rV)\} \sin Kr dr$$

и, следовательно,

$$\int_0^{\infty} (rV) \sin Kr dr = -\frac{4\pi g^2}{K^2 + \kappa^2} \int_0^{\infty} r \rho(r) \sin Kr dr.$$

В случае точечного ядра имеем

$$f_0(\vartheta) = \frac{2mg^2 A}{\hbar^2 (K^2 + \kappa^2)}, \quad (108.15)$$

а для протяженного ядра должно быть

$$f(\vartheta) = f_0(\vartheta) F(K), \quad (108.16)$$

где формфактор

$$F = \frac{4\pi}{A} \int_0^{\infty} r^2 \rho(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr \quad (108.17)$$

по существу определяется тем же выражением, что и раньше.

Задача 109. Высокоэнергетическое рассеяние на жесткой сфере

Показать, что сечение рассеяния на жесткой сфере радиусом R для очень больших энергий приближается к значению $2\pi R^2$.

Решение. Борновское приближение, обычно применяемое в области высоких энергий, становится несостоятельным в случае сингулярных потенциалов, так как фигурирующий в нем интеграл расходится. По этой причине мы вынуждены использовать метод разложения по парциальным волнам, несмотря на то, что сходимость этого метода с ростом энергии ухудшается.

Для любого значения l радиальная волновая функция вне жесткой сферы имеет вид

$$\chi_l(r) = j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \sin \delta_l \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (109.1)$$

и должна удовлетворять граничному условию

$$\chi_l(R) = 0. \quad (109.2)$$

Таким образом, имеем

$$\operatorname{tg} \delta_l = \frac{j_l(x)}{n_l(x)}, \quad x = kR, \quad (109.3)$$

и, следовательно, сечение рассеяния будет равно

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{j_l^2(x)}{j_l^2(x) + n_l^2(x)}. \quad (109.4)$$

Если энергия столь велика, что $x \gg 1$, то бесконечную сумму (109.4) можно разбить на две части. Члены суммы, для которых $l < x$, описывают частицы, сталкивающиеся со сферой ($\hbar l < mvR$), и соответствующие функции j_l и n_l можно заменить их асимптотическими выражениями:

$$\begin{aligned} j_l(x) &= \sin\left(x - \frac{l\pi}{2}\right), \\ n_l(x) &= -\cos\left(x - \frac{l\pi}{2}\right). \end{aligned} \quad (109.5)$$

Членам же с $l > x$ в классической картине соответствуют частицы, пролетающие мимо сферы, не сталкиваясь с ней ($\hbar l > mvR$). В этом случае функции j_l и n_l можно заменить первыми членами их разложения в степенной ряд. Так как при такой замене

$$j_l \sim x^{l+1} \quad \text{и} \quad n_l \sim x^{-l},$$

то отношение, фигурирующее в формуле (109.4), оказывается очень малой величиной и всеми этими слагаемыми можно пренебречь. Таким образом, в рассматриваемом приближении можно написать

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{[x]} (2l+1) \sin^2\left(x - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (109.6)$$

Конечно, все эти рассуждения теряют силу применительно к тем членам, для которых $l \approx x$ и где неправомерна ни одна из употребленных нами аппроксимаций функций j_l и n_l . Однако чем больше величина x и чем больше членов содержит сумма (109.6), тем меньшую роль играет эта небольшая группа членов и тем, следовательно, меньше ошибка нашего приближения в целом.

Преобразуем правую часть равенства (109.6) с помощью тождества

$$\sin^2 \left(x - \frac{l\pi}{2} \right) = \sin^2 x + \sin^2 \frac{l\pi}{2} \cos 2x.$$

В результате имеем

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \left\{ \sin^2 x \sum_{l=0}^{[x]} (2l+1) + \cos 2x \sum_{l=1, 3, 5, \dots}^{[x]} (2l+1) \right\}.$$

Обе суммы вычисляются элементарно и соответственно равны

$$\sum_{l=0}^{[x]} (2l+1) = (x+1)^2$$

и

$$\sum_{l=1, 3, 5, \dots}^{[x]} (2l+1) = \frac{1}{2} (x+1)(x+2).$$

Поэтому получаем

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \left\{ -(x+1) \sin^2 x + \frac{1}{2} (x+1)(x+2) \right\}. \quad (109.7)$$

Так как наше приближение справедливо лишь при условии $x \gg 1$, то в этой формуле достаточно удержать только основной член. Таким образом, окончательно наша формула принимает вид

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \cdot \frac{1}{2} x^2 = 2\pi R^2, \quad (109.8)$$

что и доказывает утверждение, сформулированное в условии задачи.

Замечание редактора перевода. Может показаться странным, что эффективное сечение рассеяния равно удвоенному геометрическому поперечному сечению. Однако этот эффект хорошо известен в классической волновой оптике и объясняется тем, что рассеянная волна состоит из двух частей одинаковой интенсивности: одна из них соответствует волне, отраженной от препятствия, другая обеспечивает образование тени. Для каждой из них поперечное сечение равно πR^2 . Подробное обсуждение этого вопроса можно найти, например, в монографии: Морс Ф., Фейнбах Г., Методы теоретической физики, т. 2, ИЛ, 1960, стр. 354 и далее.

Задача 110. Формула Резерфорда

Решить задачу о рассеянии точечного заряда в кулоновском поле другого точечного заряда, воспользовавшись параболическими координатами.

Решение. Запишем уравнение Шредингера

$$\nabla^2 u + \left(k^2 - \frac{2k\kappa}{r} \right) u = 0, \quad (110.1)$$

воспользовавшись стандартными обозначениями:

$$k = \frac{mv}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{e_1 e_2}{\hbar v}, \quad 2k\kappa = \frac{2m}{\hbar^2} e_1 e_2, \quad (110.2)$$

где e_1 и e_2 — величины точечных зарядов, m — масса рассеиваемых частиц, а v — их скорость на бесконечности. Задача обладает очевидной симметрией относительно поворотов вокруг оси z , поэтому решение зависит лишь от координат, характеризующих положение частицы в меридиональной плоскости, таких, скажем, как r и ϑ , или же если пользоваться параболическими координатами, то от

$$\begin{aligned} \xi &= r - z = 2r \sin^2 \frac{\vartheta}{2}, \\ \eta &= r + z = 2r \cos^2 \frac{\vartheta}{2}. \end{aligned} \quad (110.3)$$

В целесообразности применения этих координат нетрудно убедиться, вспомнив, как выглядит формула Резерфорда. Если отвлечься от фазового множителя, то асимптотика решения, приводящего к формуле Резерфорда, должна иметь вид

$$u \rightarrow e^{ikz} + \frac{C}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} = e^{ikz} \left\{ 1 + \frac{2C}{\xi} e^{ik\xi} \right\}.$$

Отсюда следует, что имеется надежда с помощью разделения переменных

$$u = e^{ikz} v(\xi) \quad (110.4)$$

свести задачу к нахождению функции, зависящей только от одной переменной ξ .

Подставляя выражение (110.4) в уравнение Шредингера (110.1), получаем

$$\nabla^2 v + 2ik \frac{\partial v}{\partial z} - \frac{2k\kappa}{r} v = 0,$$

причем на функцию v пока еще не наложено никаких специальных ограничений. Пользуясь определениями (110.3) и опуская

производные по переменным η и φ , можно написать

$$\nabla^2 v = \frac{4}{\xi + \eta} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{dv}{d\xi} \right),$$

$$\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{2\xi}{\xi + \eta} \frac{dv}{d\xi}, \quad r = \frac{1}{2} (\xi + \eta),$$

так что наше дифференциальное уравнение приводится к виду

$$\xi \frac{d^2 v}{d\xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{dv}{d\xi} - k\eta v = 0. \quad (110.5)$$

Это — известное уравнение Куммера, решениями которого являются вырожденные гипергеометрические функции. Решение, регулярное в точке $\xi = 0$, имеет вид

$$v = C {}_1F_1(-i\kappa, 1; ik\xi). \quad (110.6)$$

Отсюда для волновой функции u , отвечающей задаче рассеяния, получаем

$$u = C e^{ikz} {}_1F_1(-i\kappa, 1; ik\xi), \quad (110.7)$$

причем постоянную C еще следует выбрать надлежащим образом. Чтобы убедиться в этом, мы должны найти асимптотику волновой функции (110.7) при больших абсолютных значениях чисто мнимого аргумента $ik\xi$ ($k\xi > 0$). Здесь имеется одна небольшая математическая трудность, связанная с тем, что в данном случае мы не можем воспользоваться известным асимптотическим выражением

$${}_1F_1(a, c; z) \rightarrow e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} z^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^{z} z^{a-c}, \quad (110.8)$$

$$|z| \gg |a|, \quad |z| \gg |c|, \quad c \neq -n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Дело в том, что приведенная асимптотическая формула для вырожденной гипергеометрической функции справедлива на комплексной плоскости z с разрезом вдоль положительной мнимой полуоси. Однако эту трудность легко обойти, если заметить, что к комплексно сопряженной функции u^* формулу (110.8) можно применять без всяких опасений. Таким образом, имеем

$${}_1F_1(i\kappa, 1; -ik\xi) \rightarrow \frac{e^{\pi\kappa}}{\Gamma(1-i\kappa)} (-ik\xi)^{-i\kappa} + \frac{1}{\Gamma(i\kappa)} e^{-ik\xi} (-ik\xi)^{i\kappa-1}.$$

Учитывая далее, что

$$(-ik\xi)^{-i\kappa} = \left(e^{-\frac{i\pi}{2}} k\xi \right)^{-i\kappa} = e^{-\frac{\pi\kappa}{2}} e^{-i\kappa \ln k\xi}$$

и что

$$\Gamma(1+i\kappa) = i\kappa \Gamma(i\kappa),$$

находим

$${}_1F_1(i\kappa, 1; -ik\xi) \rightarrow \frac{e^{\frac{\pi\kappa}{2}}}{\Gamma(1-i\kappa)} \left\{ e^{-i\kappa \ln k\xi} - \kappa \frac{\Gamma(1-i\kappa)}{\Gamma(1+i\kappa)} e^{-ik\xi} \frac{e^{i\kappa \ln k\xi}}{k\xi} \right\}. \quad (110.9)$$

Произведем в этой формуле комплексное сопряжение и подставим получающийся результат в правую часть равенства (110.7), положив там

$$C = e^{-\frac{\pi\kappa}{2}} \Gamma(1 + i\kappa). \quad (110.10)$$

Если, кроме того, принять во внимание, что $z + \xi = r$, то окончательное выражение для асимптотики волновой функции (110.7) будет иметь вид

$$u \rightarrow e^{i \left[kz + \kappa \ln \left(2kr \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right) \right]} - \frac{\kappa e^{2i\eta_0}}{2k \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \cdot \frac{e^{i \left[kr - \kappa \ln \left(2kr \sin^2 \frac{\vartheta}{2} \right) \right]}}{r}, \quad (110.11)$$

где

$$\eta_0 = \arg \Gamma(1 + i\kappa). \quad (110.12)$$

Мы видим, что рассматриваемое решение действительно имеет стандартную нормировку и отвечает задаче рассеяния. Единственное его отличие от волновых функций, встречающихся нам в других подобных задачах, — это характерное для кулоновского поля логарифмическое искажение фазы. Зная выражение для амплитуды расходящейся сферической волны, мы можем сразу же написать формулу Резерфорда для дифференциального сечения рассеяния:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 = \left(\frac{\kappa}{2k \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \right)^2 = \left(\frac{e_1 e_2}{4E} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}}. \quad (110.13)$$

Замечание 1. При $r=0$ из формулы (110.7) следует, что $u=C$, поэтому с учетом равенства (110.10) имеем

$$|u(0)|^2 = e^{-\pi\kappa} |\Gamma(1 + i\kappa)|^2.$$

Пользуясь известными свойствами Γ -функции, последнее выражение можно записать в виде

$$|u(0)|^2 = e^{-\pi\kappa} \cdot \frac{\pi\kappa}{\operatorname{sh} \pi\kappa} = \frac{2\pi\kappa}{e^{2\pi\kappa} - 1}. \quad (110.14)$$

Для положительных значений κ оно всегда меньше единицы, если же $2\pi\kappa \gg 1$, то это выражение становится экспоненциально малой величиной. Вспоминая, что

$$2\pi\kappa = \frac{2\pi e_1 e_2}{\hbar v},$$

мы, таким образом, видим, что в случае одноименных зарядов вероятность проникновения сквозь потенциальный барьер характеризуется множителем (фактор Гамова), который очень быстро убывает по мере уменьшения энергии рассеиваемой частицы.

Замечание 2. Мы вывели асимптотическую формулу (110.11) в предположении, что $k\xi \gg c$, где $c \gg 1$, а не в предположении, что $kr \gg 1$. Следовательно,

она выполняется не для точек, расположенных вне сферы $r=c/k$, а для точек, лежащих вне параболоида

$$2kr \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = c, \text{ или } r - z = \frac{c}{k}. \quad (110.15)$$

Таким образом, эта формула может оказаться неверной даже для очень больших значений r , если только значения угла ϑ достаточно малы. Однако практически это ограничение не является существенным. В большинстве случаев длина волны не превышает атомных размеров, так что, скажем, $1/k = 10^{-7}$ см, счетчик же, детектирующий рассеяние частицы, находится от мишени по крайней мере на расстоянии $r=10$ см. Таким образом, $kr=10^8$. Пусть далее $c \approx 10^3$, тогда формула (110.15) приводит к значению $\vartheta = 10^{-5}$, но для таких малых углов вряд ли можно надеяться отделить рассеянный пучок от падающего.

Задача 111. Разложение кулоновской функции по парциальным волнам

Разложить по парциальным волнам волновую функцию, полученную в предыдущей задаче.

Решение. Так как кулоновский потенциал зависит только от r , то кулоновскую волновую функцию с таким же успехом можно найти, пользуясь разделением переменных в сферических координатах. В этом случае она должна иметь вид

$$u = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} C_l \chi_l(r) P_l(\cos \vartheta), \quad (111.1)$$

причем радиальные функции χ_l обязаны удовлетворять уравнению

$$\chi_l'' + \left[k^2 - \frac{2kx}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi_l = 0 \quad (111.2)$$

и граничному условию

$$\chi_l(0) = 0. \quad (111.3)$$

С помощью подстановки

$$\chi_l = (2kr)^{l+1} e^{ikr} F(\rho), \quad \rho = -2ikr \quad (111.4)$$

уравнение (111.2) приводится к уравнению Куммера

$$\rho F'' + (2l + 2 - \rho) F' - (l + 1 + ix) F = 0, \quad (111.5)$$

регулярное решение которого имеет вид

$$F(\rho) = a_l {}_1F_1(l + 1 + ix, 2l + 2; -2ikr). \quad (111.6)$$

Нормировочную постоянную a_l мы выберем позднее. Асимптотику решения (111.6) можно найти непосредственно с помощью формулы (110.8) предыдущей задачи. Полагая

$$\eta_l = \arg \Gamma(l + 1 + ix), \quad (111.7)$$

получаем

$$F(\rho) \rightarrow a_l (2kr)^{-l-1} \frac{e^{\frac{\pi\kappa}{2}(2l+1)}}{\Gamma(l+1-i\kappa)} \times \\ \times \left\{ e^{-\frac{i\pi}{2}(l+1)} e^{-i\kappa \ln 2kr} + e^{\frac{i\pi}{2}(l+1)} e^{i\kappa \ln 2kr - 2i\eta_l - 2ikr} \right\}.$$

Подставляя это выражение в формулу (111.4) и выбирая постоянную a_l в виде

$$a_l = e^{-\frac{\pi\kappa}{2}} \frac{|\Gamma(l+1+i\kappa)|}{2(2l+1)!}, \quad (111.8)$$

находим, что функция

$$\chi_l(r) = a_l (2kr)^{l+1} e^{ikr} {}_1F_1(l+1+i\kappa, 2l+2; -2ikr) \quad (111.9)$$

имеет асимптотику вида

$$\chi_l \rightarrow \sin \left(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2} \right). \quad (111.10)$$

Теперь наша задача состоит в том, чтобы выразить определенную в предыдущей задаче функцию u в виде ряда (111.1) с функциями χ_l , заданными формулами (111.8)–(111.10). Функция u , записанная в сферических координатах, выглядит следующим образом:

$$u(r, \vartheta) = e^{-\frac{\pi\kappa}{2}} \Gamma(1+i\kappa) e^{ikr \cos \vartheta} {}_1F_1[-i\kappa, 1; ikr(1-\cos \vartheta)]. \quad (111.11)$$

Обращая ряд (111.1), находим

$$C_l \frac{\chi_l(r)}{r} = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 u(r, \vartheta) P_l(\cos \vartheta) d(\cos \vartheta). \quad (111.12)$$

Если теперь подставить сюда выражение (111.11) и ввести новую переменную

$$x = -ik\xi = -ikr(1-\cos \vartheta), \quad (111.13)$$

то нетрудно получить соотношения

$$C_l \frac{\chi_l(r)}{r} = \frac{2l+1}{2ik} e^{-\frac{\pi\kappa}{2}} \Gamma(1+i\kappa) \frac{e^{ikr}}{r} J_l \quad (111.14)$$

и

$$J_l = \int_{-2ikr}^0 {}_1F_1(1+i\kappa, 1; x) P_l \left(1 + \frac{x}{ikr} \right) dx. \quad (111.15)$$

При этом мы учли, что с помощью тождества

$$e^x {}_1F_1(a, c; -x) = {}_1F_1(c-a, c; x)$$

выражение

$$u = e^{-\frac{\pi x}{2}} \Gamma(1 + i\kappa) e^{ikr} e^{ix} {}_1F_1(-i\kappa, 1; -x)$$

приводится к виду

$$u = e^{-\frac{\pi x}{2}} \Gamma(1 + i\kappa) e^{ikr} {}_1F_1(1 + i\kappa, 1; x).$$

Таким образом, наша задача теперь сводится к вычислению интегралов J_l , в частности, при условии $kr \gg 1$. Это можно сделать с помощью повторного интегрирования по частям, если принять во внимание тождество

$${}_1F_1(a, 1; x) = \frac{d}{dx} [{}_1F_1(a, 1; x) - {}_1F_1(a-1, 1; x)]. \quad (111.16)^{1)}$$

В результате n -кратного интегрирования по частям P_l в подынтегральном выражении заменится производной

$$\frac{d^n P_l}{dx^n} = (ikr)^{-n} P_l^{(n)}$$

(через $P_l^{(n)}$ мы обозначаем n -ю производную P_l по его аргументу). Но P_l представляет собой полином степени l , поэтому процедура интегрирования по частям оборвется на l -м шаге. Детали этого расчета даны в приложении, помещенном в конце задачи, а результат при $kr \gg 1$ имеет вид

$$J_l \rightarrow - \sum_{n=0}^l \left(\frac{i}{kr}\right)^n P_l^{(n)}(-1) \times \left\{ \frac{1}{\Gamma(1+i\kappa)} e^{-2ikr} (-2ikr)^{i\kappa} + (-1)^{n+1} \frac{e^{-i\pi(l\kappa-n)}}{\Gamma(1+n-i\kappa)} (-2ikr)^{n-i\kappa} \right\}. \quad (111.17)$$

Если $n=0$, то оба члена в фигурных скобках имеют одинаковый порядок величины, в противном случае вклад дает лишь второй член. С помощью приведенного в приложении равенства (111.22) после небольших преобразований получаем

$$J_l \rightarrow (-1)^{l+1} \frac{e^{\frac{\pi\kappa}{2}}}{\Gamma(1+i\kappa)} \times \left\{ e^{-2ikr + i\kappa \ln 2kr} - \left[\sum_{n=0}^l (-1)^n \frac{(l+n)!}{n!(l-n)!} \cdot \frac{\Gamma(1+i\kappa)}{\Gamma(1+n-i\kappa)} \right] e^{-i\kappa \ln 2kr} \right\}.$$

¹⁾ Указанное тождество следует из общей формулы

$$\frac{d}{dx} [{}_1F_1(a, c; x) - {}_1F_1(a-1, c; x)] = {}_1F_1(a, c; x) + \frac{1-c}{c} {}_1F_1(a, c+1; x),$$

если в ней положить $c=1$; эту формулу легко вывести с помощью соотношений, приведенных в приложении (см. т. 2, стр. 304).

Можно показать, что коэффициент в квадратных скобках равен

$$e^{2i\left(\eta_l - \frac{l\pi}{2}\right)},$$

и, следовательно,

$$J_l \rightarrow (-1)^l \frac{e^{\frac{\pi\kappa}{2}}}{\Gamma(1+i\kappa)} 2ie^{i\left(\eta_l - \frac{l\pi}{2}\right)} e^{-ikr} \times \\ \times \sin\left(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2}\right). \quad (111.18)$$

Подставляя это выражение в равенство (111.14) и используя асимптотику (111.10) для функции χ_l , получаем

$$C_l = \frac{1}{k} (2l+1) i^l e^{i\eta_l}, \quad (111.19)$$

поэтому окончательно искомое разложение при больших kr принимает вид

$$u \rightarrow \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\eta_l} \times \\ \times \sin\left(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_l - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos \vartheta). \quad (111.20)$$

Заметим, что в известном смысле волновая функция (111.11) и ее разложение по парциальным волнам аналогичны плоской волне и ее разложению по парциальным волнам. Если исключить влияние кулоновского поля, положив $\kappa=0$, то, согласно равенству (111.7), мы будем иметь $\eta_l=0$, и, следовательно, функция χ_l , определяемая выражением (111.9), перейдет в сферическую функцию Бесселя, а волновая функция u и разложение (111.20) соответственно перейдут в плоскую волну и ее разложение по парциальным волнам.

Приложение. Ниже вместо ${}_1F_1(a, 1; x)$ мы будем просто писать F_a . Однократное интегрирование по частям дает

$$\int P_l F_{a+1} dx = \int P_l \frac{d}{dx} (F_{a+1} - F_a) dx = \\ = P_l (F_{a+1} - F_a) + \frac{i}{kr} \int P_l' (F_{a+1} - F_a) dx.$$

Повторяя эту процедуру l раз, получаем

$$\int P_l F_{a+1} dx = \sum_{n=0}^l \left(\frac{i}{kr}\right)^n P_l^{(n)} \times \\ \times \left\{ F_{a+1} - \binom{n+1}{1} F_a + \binom{n+1}{2} F_{a-1} \mp \dots + (-1)^{n+1} F_{a-n} \right\}.$$

На верхнем пределе, когда $x=0$, все $F_\nu = 1$ и выражение в фигурных скобках обращается в нуль. Таким образом, у нас остается только вклад от ниж-

него предела, где $x = -2ikr$ и аргументы полиномов Лежандра равны -1 , поэтому имеем

$$J_l = \sum_{n=0}^l \left(\frac{i}{kr}\right)^n P_l^{(n)}(-1) \sum_{\nu=-1}^n (-1)^\nu \binom{n+1}{\nu+1} F_{a-\nu}, \quad (111.21)$$

$$F_{a-\nu} = {}_1F_1(ix-\nu, 1; -2ikr).$$

При $kr \gg 1$ имеет место асимптотическая формула

$$F_{a-\nu} \rightarrow \frac{e^{-i\pi(ix-\nu)}}{\Gamma(1+\nu-ix)} (-2ikr)^{\nu-ix} + \frac{e^{-2ikr}}{\Gamma(-\nu+ix)} (-2ikr)^{-\nu-1+ix}.$$

Первый член в ней пропорционален $(kr)^\nu$, а второй $-(kr)^{-\nu-1}$. В сумме (111.21) значение ν ограничено интервалом $-1 \leq \nu \leq n$, поэтому ее асимптотическое выражение будет определяться первым членом слагаемого с $\nu=n$ и вторым членом слагаемого с $\nu=-1$, так что в результате мы получим формулу (111.17), приведенную выше.

Значения производных полиномов Лежандра легко получить, воспользовавшись соотношением

$$P_l(\cos \vartheta) = {}_2F_1(l+1, -l, 1; t) = \sum_{m=0}^l (-1)^m \frac{(l+m)!}{(l-m)! m!} t^m,$$

где

$$t = \frac{1}{2}(1 - \cos \vartheta).$$

Дифференцируя обе части этого равенства n раз по t и полагая затем $t=0$ ($\cos \vartheta = 1$), находим

$$\frac{d^n P_l(1)}{dt^n} = n! (-1)^n \frac{(l+n)!}{(l-n)! n!^2}$$

и, следовательно,

$$P_l^{(n)}(1) = \frac{d^n P_l(1)}{(d \cos \vartheta)^n} = (-1)^{l+n} \frac{(l+n)!}{2^n (l-n)! n!}$$

и

$$P_l^{(n)}(-1) = \frac{(l+n)!}{2^n (l-n)! n!}. \quad (111.22)$$

Задача 112. Аномальное рассеяние

Пусть наряду с кулоновским полем предыдущей задачи имеется короткодействующий потенциал (например, ядерные силы или конечное распределение электрического заряда) и пусть $kr \ll 1$, где R — радиус действия этих дополнительных сил. Выразить амплитуду рассеяния через дополнительный сдвиг фаз рассеяния.

Решение. Если $kr \ll 1$, то благодаря наличию дополнительных короткодействующих сил изменится лишь одна фаза s -рассеяния. Вместо асимптотической формулы (111.10) предыдущей задачи мы теперь имеем формулу

$$\tilde{\chi}_0 \rightarrow A \sin(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_0 + \delta_0), \quad (112.1)$$

где δ_0 — дополнительный сдвиг фазы рассеяния. Это выражение мы должны сравнить с первоначальной формулой для точечного заряда:

$$\chi_0 \rightarrow \sin(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_0). \quad (112.2)$$

Их разность

$$\tilde{\chi}_0 - \chi_0 \rightarrow \frac{1}{2i} \left\{ e^{i(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_0)} (Ae^{i\delta_0} - 1) - e^{-i(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_0)} \times \right. \\ \left. \times (Ae^{-i\delta_0} - 1) \right\}$$

должна содержать только одну *расходящуюся* сферическую волну, следовательно, должно быть

$$Ae^{-i\delta_0} = 1 \quad (112.3)$$

и

$$\tilde{\chi}_0 - \chi_0 \rightarrow \frac{1}{2i} (e^{2i\delta_0} - 1) e^{i(kr - \kappa \ln 2kr + \eta_0)}. \quad (112.4)$$

Таким образом, необходимо дополнить правую часть равенства (111.20) новым членом

$$\frac{1}{kr} e^{i\eta_0} (\tilde{\chi}_0 - \chi_0).$$

Заменяя далее разложение (111.20) выражением (110.11), получаем для рассеянной волны формулу вида

$$u_{\text{рас}} \rightarrow \frac{e^{i(kr - \kappa \ln 2kr + 2\eta_0)}}{2kr} \left\{ -\frac{\kappa}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}} e^{-i\kappa \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} - i(e^{2i\delta_0} - 1) \right\}, \quad (112.5)$$

поэтому амплитуда рассеяния теперь равна

$$f(\vartheta) = -\frac{\kappa}{2k \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} e^{-i\kappa \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1). \quad (112.6)$$

Следует отметить два обстоятельства: во-первых, дополнительный член не зависит от угла рассеяния и сильнее всего скажется при больших углах, где собственно резерфордовский член мал; во-вторых, в сечении рассеяния $|f(\vartheta)|^2$ теперь будет присутствовать интерференционный член резерфордовского и аномального рассеяния.

Задача 113. Преобразование Зоммерфельда — Ватсона

Пусть амплитуда рассеяния

$$f(\vartheta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \vartheta) \quad (113.1)$$

записана в виде контурного интеграла в плоскости комплексной переменной l в предположении, что каждый член суммы (113.1)

есть вычет подынтегрального выражения в точке с целочисленным значением l . Считая, что $f_l \equiv f(l)$ — мероморфная функция переменной l , представить этот интеграл в виде суммы полюсных членов и интеграла, взятого по прямой, параллельной мнимой оси и проходящей через точку $l = -1/2$.

Решение. Целесообразно переменную l заменить комплексной переменной

$$\lambda = l + \frac{1}{2}. \quad (113.2)$$

Тогда формулу (113.1) можно заменить равенством

$$f(\vartheta) = \frac{1}{\pi i} \int_C \lambda f\left(\lambda - \frac{1}{2}\right) \frac{P_{\lambda-1/2}(-\cos \vartheta)}{\cos \pi \lambda} d\lambda, \quad (113.3)$$

где контур интегрирования C показан на фиг. 60. Действительно, функция

$$\frac{1}{\cos \pi \lambda} = -\frac{1}{\sin \pi i}$$

имеет простые полюсы во всех целочисленных точках $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ (т. е. в точках $\lambda = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$), и ее вычеты в них равны $(-1)^{l+1}$. Если остальные множители подынтегрального выражения (113.3) регулярны на положительной действительной полуоси, то интеграл по контуру C можно заменить суммой интегралов, каждый из которых берется в направлении часовой стрелки (множитель $-2\pi i$) по малой окружности с центром в одном из упомянутых полюсов. Таким образом, имеем

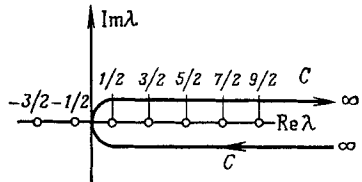
$$f(\vartheta) = \frac{1}{\pi i} \sum_{l=0}^{\infty} (-2\pi i) (-1)^{l+1} \left(l + \frac{1}{2}\right) f(l) P_l(-\cos \vartheta). \quad (113.4)$$

С учетом четности полиномов Лежандра:

$$(-1)^l P_l(-\cos \vartheta) = P_l(\cos \vartheta), \quad l - \text{целое число}, \quad (113.5)$$

выражение (113.4) в точности переходит в формулу (113.1).

Деформируем теперь контур интегрирования в комплексной плоскости λ таким образом, чтобы он проходил по мнимой оси и замыкался бесконечной полуокружностью, лежащей в правой полуплоскости. Последняя не будет давать вклад в интеграл, если подынтегральная функция убывает на ней по крайней мере как $|\lambda|^{-1-\varepsilon}$, что и предполагается всюду в дальнейшем. В результате у нас остается вклад от интеграла по мнимой оси и вклад от всех полюсов, которые расположены в правой полуплоскости и которые наш контур пересекал в процессе деформации. Пусть



Фиг. 60. Контур интегрирования в комплексной плоскости переменной λ .

эти полюсы располагаются в точках $\lambda = \alpha_n$ и пусть вычеты функции $f(l)$ равны в них β_n , тогда вклад полюсных членов в амплитуду рассеяния будет иметь вид

$$f_P(\vartheta) = 2 \sum_n \beta_n \frac{\alpha_n P_{\alpha_n - 1/2}(-\cos \vartheta)}{\cos \pi \alpha_n}. \quad (113.6)$$

Что касается интегрального члена, то с помощью замены переменной

$$\lambda = iy,$$

где y — действительная величина, его можно записать следующим образом:

$$f_B(\vartheta) = -\frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} y f\left(iy - \frac{1}{2}\right) \frac{P_{iy - 1/2}(-\cos \vartheta)}{\operatorname{ch} \pi y} dy. \quad (113.7)$$

Мы видим, что амплитуда рассеяния $f(\vartheta)$ действительно разбивается на две существенно различные части:

$$f(\vartheta) = f_P(\vartheta) + f_B(\vartheta). \quad (113.8)$$

Замечание. Полюсы амплитуды рассеяния $f(l)$ в плоскости комплексной переменной l называют *полюсами Редже*, а линии, по которым они перемещаются в этой плоскости при изменении энергии, — *траекториями Редже*. Важность полюсов Редже обусловлена тем, что они дают в наше распоряжение альтернативную возможность описать взаимодействие между сталкивающимися частицами, которое обычно описывается с помощью потенциала. Если положение полюсов α_n и вычеты в них амплитуды рассеяния β_n известны, то рассеяние можно описать с помощью этих параметров. Этот метод, по-видимому, должен быть особенно удобен в физике элементарных частиц, так как экспериментальные данные свидетельствуют о наличии резко выраженных резонансных состояний (промежуточные частицы или резонаны). Конечно, там приходится иметь дело с очень высокими энергиями, и вся теория должна быть сформулирована релятивистским образом. Что касается нерелятивистской теории, то ее можно использовать в ядерной физике для описания компаунд-ядра.

Задача 114. Полюс Редже

Пусть при данном значении энергии полюс функции $f(l)$ располагается вблизи физического значения l , например вблизи $l = L$, где L — целое число. Какая физическая ситуация описывается этим полюсом, если значение энергии подвергается небольшому изменению?

Решение. Мы будем рассматривать вклад в амплитуду рассеяния от одного-единственного члена суммы (113.6), который, опуская индекс n , можно записать в виде

$$f_P(\vartheta) = 2\beta\alpha \frac{P_{\alpha - 1/2}(-\cos \vartheta)}{\cos \pi \alpha}. \quad (114.1)$$

В этой формуле

$$\alpha = L + \frac{1}{2} + \xi + i\eta, \quad (114.2)$$

а оба действительных числа, ξ и η , предполагаются малыми ($|\xi| \ll 1$, $|\eta| \ll 1$). Таким образом, имеем

$$\cos \pi \alpha = (-1)^L \sin \pi (\xi + i\eta). \quad (114.3)$$

Функцию Лежандра с комплексным индексом $\nu = \alpha - 1/2$ можно выразить через обычные полиномы Лежандра:

$$P_\nu(t) = \frac{\sin \pi \nu}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \frac{P_n(-t)}{(\nu-n)(\nu+n+1)}, \quad (114.4)$$

поэтому в рассматриваемом нами случае должно быть

$$P_{\alpha-1/2}(-\cos \vartheta) = \frac{(-1)^L \sin \pi (\xi + i\eta)}{\pi} \times \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1) P_n(\cos \vartheta)}{(L-n+\xi+i\eta)(L+n+1+\xi+i\eta)}, \quad (114.5)$$

и, следовательно,

$$f_P(\vartheta) = \frac{2\beta}{\pi} \left(L + \frac{1}{2} + \xi + i\eta \right) \times \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1) P_n(\cos \vartheta)}{(L-n+\xi+i\eta)(L+n+1+\xi+i\eta)}. \quad (114.6)$$

До сих пор мы не делали никаких приближений, и вклад полюсного члена учитывался точно. Теперь мы воспользуемся малостью величин ξ и η , из-за которой первый сомножитель в знаменателе дроби (114.6) становится при $n=L$ очень малой величиной. По этой причине указанный член оказывается значительно больше других членов и в резонансном приближении последние можно не учитывать. Таким образом, имеем

$$f_P(\vartheta) \approx \frac{\beta}{\pi} (2L+1) \frac{P_L(\cos \vartheta)}{\xi+i\eta}. \quad (114.7)$$

Перейдем теперь к изучению зависимости этого выражения от энергии E рассеиваемой частицы. Положению полюса в точке $\lambda = \alpha$, разумеется, соответствует некоторое определенное действительное значение энергии E , но момент количества движения при этом не является целочисленным и, следовательно, не соответствует никакому реальному физическому состоянию. Если теперь предположить, что состояние, отвечающее физическому целочисленному значению момента количества движения L , располагается вблизи рассматриваемого полюса, то энергия такого состояния будет комплексной величиной — ее действительная часть E_0 будет близка к E , а мнимая часть мала. Таким образом, можно написать

$$E_L = E_0 - \frac{1}{2} i\Gamma. \quad (114.8)$$

Согласно соотношению (114.2), это означает, что величины ξ и η , рассматриваемые как функции энергии, должны быть связаны равенством

$$\xi(E_L) + i\eta(E_L) = 0. \quad (114.9)$$

Пусть теперь E — действительная энергия реального физического состояния и пусть она не слишком отличается от E_L , тогда можно написать

$$\xi(E) + i\eta(E) = \left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E=E_L} (E - E_L). \quad (114.10)$$

Подставляя последнее выражение в формулу (114.7), получаем

$$f_P(\vartheta) = \frac{\beta}{\pi} \frac{2L+1}{(d\alpha/dE)_{E=E_L}} P_L(\cos \vartheta) \frac{1}{E - E_0 + \frac{1}{2} i\Gamma}. \quad (114.11)$$

Такому виду амплитуды рассеяния отвечает типичное резонансное сечение рассеяния Брейта — Вигнера:

$$|f_P(\vartheta)|^2 \sim \frac{1}{(E - E_0)^2 + \frac{1}{4} \Gamma^2}. \quad (114.12)$$

Здесь E_0 имеет смысл резонансной энергии, а Γ означает ширину резонансной линии, связанную со средним временем жизни промежуточного резонансного состояния соотношением $\tau = \hbar/\Gamma$.

Предположим теперь, что значению энергии $E = E_0$ на траектории Редже соответствует точка, для которой ξ и η равны соответственно ξ_0 и η_0 , тогда для значения $\lambda = L + 1/2$ мы имеем

$$L + \frac{1}{2} = \alpha(E_0) + \left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E=E_0} (E_L - E_0),$$

что с учетом соотношений (114.9) и (114.8) дает

$$\xi_0 + i\eta_0 = \frac{1}{2} i\Gamma \left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E=E_0}. \quad (114.13)$$

Оказывается, что производная $(d\alpha/dE)_{E=E_0}$ практически является действительной величиной (см. ниже), и поэтому $\xi_0 = 0$, а

$$\eta_0 = \frac{1}{2} \Gamma \left(\frac{d\alpha}{dE}\right)_{E=E_0}, \quad (114.14)$$

причем величина η_0 может служить мерой ширины резонансной линии.

Замечание. В случае потенциального рассеяния доказать, что производная $d\alpha/dE$ вблизи от резонанса является действительной величиной, можно довольно легко: см. *De Alfaro V., Regge T., Potential Scattering*, Amsterdam, 1965, p. 104. (Имеется перевод: *де Альфаро В., Редже Т., Потенциальное рассеяние*, изд-во „Мир“, 1966, стр. 138.— *Прим. ред.*) Если R — эффективный размер области рассеяния, а v — скорость рассеиваемых частиц, то, кроме того, можно показать, что $d\alpha/dE \approx R/(\hbar v)$.

Д. Приближение Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна (ВКБ)

Задача 115. Разложение эйконала

Решить уравнение Шредингера, воспользовавшись известным из оптики методом решения волнового уравнения

$$\nabla^2 u + k^2 n^2(\mathbf{r}) u = 0 \quad (115.1)$$

с помощью процедуры последовательных приближений. С этой целью ввести эйконал $S(\mathbf{r})$, положив

$$u = e^{\frac{2\pi i}{\lambda} S(\mathbf{r})}, \quad (115.2)$$

где $\lambda = 2\pi/k$ — длина волны в вакууме, и разложить его в ряд по степеням λ . Показатель преломления $n(\mathbf{r})$ считать медленно меняющейся функцией координат.

Решение. Пусть λ означает волну де Бройля во всех точках, где $V(\mathbf{r}) = 0$, тогда

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad p = \sqrt{2mE} = \hbar k. \quad (115.3)$$

Введем далее показатель преломления

$$n(\mathbf{r}) = \sqrt{1 - \frac{V(\mathbf{r})}{E}}. \quad (115.4)$$

Условие медленного изменения показателя преломления n означает, что он меняется заметным образом на расстоянии l , которое значительно больше λ , иначе говоря,

$$\left| \frac{1}{n} \nabla n \right| \sim \frac{1}{l} \ll \frac{1}{\lambda}. \quad (115.5)$$

Подставляя выражение (115.2) в уравнение (115.1), приходим к уравнению Риккати:

$$\frac{\lambda}{2\pi i} \nabla^2 S + (\nabla S)^2 - n^2 = 0. \quad (115.6)$$

Если бы n было постоянным, то эйконал S был бы линейной функцией координат и $\nabla^2 S = 0$. В случае медленно меняющегося n можно ожидать, что по крайней мере на расстояниях порядка λ влияние нелинейности на экспоненту (115.2) будет мало. Так как для любого направления x имеет место разложение

$$S(x + \lambda) = S(x) + \lambda S'(x) + \frac{1}{2} \lambda^2 S''(x) + \dots,$$

то вклад нелинейного члена $\frac{1}{2} \lambda^2 S''$ будет мал при условии, что

$$\left| \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \frac{1}{2} \lambda^2 S'' \right| \ll 1, \quad \text{или} \quad |\nabla^2 S| \ll \frac{1}{\lambda}.$$

В этом случае первый член уравнения Риккати (115.6) мал по сравнению с двумя другими членами, поэтому в первом приближении оно заменяется уравнением эйконала:

$$(\nabla S)^2 = n^2. \quad (115.7)$$

Разложим теперь эйконал в ряд по степеням безразмерного параметра $\lambda/2\pi l$. Мы имеем

$$S = S_0 + \frac{\lambda}{2\pi l} S_1 + \left(\frac{\lambda}{2\pi l}\right)^2 S_2 + \dots, \quad (115.8)$$

причем

$$\frac{\lambda}{2\pi l} \ll 1. \quad (115.9)$$

Подставляя это разложение в уравнение (115.6), получаем следующую систему равенств:

$$\begin{aligned} (\nabla S_0)^2 - n^2 &= 0, \\ l\nabla^2 S_0 + 2\nabla S_0 \cdot \nabla S_1 &= 0, \\ l\nabla^2 S_1 + (\nabla S_1)^2 + 2\nabla S_0 \cdot \nabla S_2 &= 0, \\ l\nabla^2 S_2 + 2\nabla S_1 \cdot \nabla S_2 + 2\nabla S_0 \cdot \nabla S_3 &= 0 \end{aligned} \quad (115.10)$$

и т. д.

Эти равенства содержат только производные искоемых функций, поэтому мы можем ввести безразмерные векторы

$$\mathbf{y}_n = \nabla S_n. \quad (115.11)$$

Выражения вида

$$l\nabla^2 S_n = l(\nabla \cdot \mathbf{y}_n)$$

будут тогда представлять собой безразмерные дивергенции векторов \mathbf{y}_n , а равенства (115.10) приобретут вид

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_0^2 &= n^2, \\ \mathbf{y}_1 \cdot \mathbf{y}_0 &= -\frac{1}{2} l(\nabla \cdot \mathbf{y}_0), \\ \mathbf{y}_2 \cdot \mathbf{y}_0 &= -\frac{1}{2} [l(\nabla \cdot \mathbf{y}_1) + \mathbf{y}_1^2], \\ \mathbf{y}_3 \cdot \mathbf{y}_0 &= -\frac{1}{2} [l(\nabla \cdot \mathbf{y}_2) + 2\mathbf{y}_1 \cdot \mathbf{y}_2] \end{aligned} \quad (115.12)$$

и т. д.

С их помощью можно последовательно определить все векторы \mathbf{y}_n , через которые, согласно (115.11), величины S_n выражаются в квадратурах. В заключение заметим, что вопрос о граничных условиях пока остается открытым.

Задача 116. Применение метода ВКБ к радиальному уравнению

Развитый в предыдущей задаче метод применить для нахождения радиальной волновой функции в случае сферически симметричного потенциала.

Решение. Если эйконал зависит только от одной переменной r , то волновое уравнение

$$\chi_l'' + Q^2(r) \chi_l = 0, \quad (116.1)$$

где

$$Q^2(r) = k^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{l(l+1)}{k^2 r^2} \right), \quad (116.2)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2},$$

с помощью подстановки

$$\chi_l = e^{\frac{2\pi i}{\lambda} S(r)}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (116.3)$$

приводится к уравнению Риккати

$$\frac{\lambda}{2\pi i} \frac{d^2 S}{dr^2} + \left(\frac{dS}{dr} \right)^2 - \frac{Q^2}{k^2} = 0. \quad (116.4)$$

Разложение

$$S = S_0 + \frac{\varepsilon}{i} S_1 + \left(\frac{\varepsilon}{i} \right)^2 S_2 + \dots \quad (116.5)$$

по степеням безразмерного параметра

$$\varepsilon = \frac{\lambda}{2\pi R} \ll 1, \quad (116.6)$$

где R — эффективный радиус области взаимодействия, позволяет получить следующую систему равенств:

$$S_0'' = \frac{Q^2}{k^2},$$

$$S_1' S_0' = -\frac{1}{2} R S_0'',$$

$$S_2' S_0' = -\frac{1}{2} [R S_1'' + S_1'^2],$$

$$S_1' S_0' = -\frac{1}{2} [R S_2'' + 2S_1' S_2'] \text{ и т. д.} \quad (116.7)$$

После введения безразмерных функций

$$y_n(r) = S'(r) \quad (116.8)$$

эти равенства принимают вид

$$\begin{aligned} y_0 &= \pm \frac{Q}{k}, \\ y_1 &= -\frac{1}{2} R \frac{y_0'}{y_0}, \\ y_2 &= -\frac{R y_1' + y_1^2}{2y_0}, \\ y_3 &= -\frac{R y_2' + 2y_1 y_2}{2y_0}. \end{aligned}$$

С их помощью мы можем последовательно выразить функции $y_n(r)$ через функцию $y_0(r)$ и ее производные:

$$\begin{aligned} y_1 &= -\frac{R}{2} \frac{y_0'}{y_0}, \quad y_2 = \frac{R^2}{4} \left(\frac{y_0''}{y_0^2} - \frac{3}{2} \frac{y_0'^2}{y_0^3} \right), \\ y_3 &= -\frac{R^3}{8} \left(\frac{y_0'''}{y_0^3} - 6 \frac{y_0' y_0''}{y_0^4} + 6 \frac{y_0'^3}{y_0^5} \right) \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (116.9)$$

Если

$$y_0 = \pm \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{l(l+1)}{k^2 r^2}} \quad (116.10)$$

— действительная величина, то действительными будут и все функции $y_n(r)$, а так как мы разлагаем функцию S по степеням чисто мнимого параметра ε/i , то последовательные приближения S_n будут попеременно то действительными, то мнимыми и будут давать вклад то в фазу, то в амплитуду радиальной волновой функции $\chi_l(r)$:

$$\chi_l(r) = \exp \int \left\{ \frac{i}{\varepsilon} y_0 + y_1 + \frac{\varepsilon}{i} y_2 + \left(\frac{\varepsilon}{i} \right)^2 y_3 + \dots \right\} \frac{dr}{R}. \quad (116.11)$$

Если мы изменим знак величины y_0 , то нечетные функции y_{2n+1} не изменят своего знака, а следовательно, не изменятся и амплитудные поправки, четные же функции y_{2n} изменят свой знак, так что в результате у нас получится комплексно сопряженное решение. Таким образом, развитый метод позволяет найти фундаментальную систему решений.

Задача 117. Граничное ВКБ-условие Лангера

Рассмотрим потенциал, соответствующий силам отталкивания. В классической точке поворота $r=r_t$ решение ВКБ имеет особенность, что не позволяет сформулировать граничное условие. Эту трудность можно обойти следующим образом. Заменяем дифференциальное уравнение, имеющее в качестве своих точных решений функции ВКБ, другим дифференциальным уравнением, которое, во-первых, согласуется с уравнением Шредингера вблизи

классической точки поворота и, во-вторых, согласуется с дифференциальным уравнением ВКБ во всей остальной области. Эту программу проще осуществить, используя в качестве независимой переменной вместо r величину

$$x = \int_{r_t}^r Q(r) dr. \quad (117.1)$$

Решение. Так как в классической точке поворота выражение

$$Q^2 = k^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{l(l+1)}{k^2 r^2} \right) \equiv k^2 n^2(r) \quad (117.2)$$

обращается в нуль, то функции ВКБ,

$$u = Q^{-1/2} \exp \left\{ \pm i \int_{r_t}^r Q(r) dr \right\}, \quad (117.3)$$

имеют сингулярную амплитуду при $r = r_t$. Нас интересует решение, конечное в точке $r = r_t$; это позволит нам продолжить осциллирующее решение из области $r > r_t$ в область $r < r_t$, где оно должно экспоненциально убывать.

Замену переменной (117.1) нетрудно сделать, заметив, что

$$\frac{d}{dr} = Q \frac{d}{dx}.$$

После указанной замены радиальное уравнение Шредингера принимает вид

$$\ddot{\chi} + \frac{\dot{Q}}{Q} \dot{\chi} + \chi = 0, \quad (117.4)$$

где точкой обозначено дифференцирование по переменной x . С другой стороны, функции ВКБ,

$$u = Q^{-1/2} e^{\pm ix}, \quad (117.5)$$

образуют фундаментальную систему решений дифференциального уравнения

$$u'' + \left[Q^2 - \frac{3}{4} \frac{Q'^2}{Q^2} + \frac{1}{2} \frac{Q''}{Q} \right] u = 0, \quad (117.6)$$

где штрих означает дифференцирование по переменной r . Переходя к переменной x , можно записать это уравнение в виде

$$\ddot{u} + \frac{\dot{Q}}{Q} \dot{u} + \left[1 - \frac{1}{4} \frac{\dot{Q}^2}{Q} + \frac{1}{2} \frac{\ddot{Q}}{Q} \right] u = 0. \quad (117.7)$$

Вблизи точки поворота $r = r_t$ функция Q^2 становится линейной функцией разности $r - r_t$, поэтому интеграл (117.1) будет пропорционален $(r - r_t)^{3/2}$. Таким образом, имеем

$$Q \sim (r - r_t)^{1/2}, \quad x \sim (r - r_t)^{3/2}$$

и, следовательно,

$$Q \sim x^{1/2}, \quad (117.8)$$

поэтому в непосредственной близости от точки поворота должны выполняться равенства

$$\frac{\dot{Q}}{Q} = \frac{1}{3x} \quad \text{и} \quad \frac{\ddot{Q}}{Q} = -\frac{2}{9x^2},$$

и мы можем при $r \approx r_t$ заменить дифференциальные уравнения (117.4) и (117.7) соответственно уравнениями

$$\ddot{\chi} + \frac{1}{3x} \dot{\chi} + \chi = 0 \quad (117.4a)$$

и

$$\ddot{u} + \frac{1}{3x} \dot{u} + \left(1 - \frac{5}{36x^2}\right) u = 0. \quad (117.7a)$$

После подстановки

$$\chi = x^{1/2} \varphi(x), \quad u = x^{1/2} f(x) \quad (117.9)$$

эти уравнения принимают вид

$$\ddot{\varphi} + \frac{1}{x} \dot{\varphi} + \left(1 - \frac{1}{9x^2}\right) \varphi = 0 \quad (117.4б)$$

и

$$\ddot{f} + \frac{1}{x} \dot{f} + \left(1 - \frac{1}{4x^2}\right) f = 0. \quad (117.7б)$$

Оба уравнения являются уравнениями Бесселя и имеют соответственно решения

$$\varphi(x) = J_{\pm 1/2}(x) \quad \text{и} \quad f(x) = J_{\pm 1/2}(x).$$

Так как при малых значениях x функция Бесселя $J_\nu(x)$ пропорциональна x^ν , то фундаментальные решения χ ведут себя как x^0 и $x^{1/2}$, т. е. оба конечны в точке $x=0$. Что же касается решений u , то они ведут себя как $x^{-1/2}$ и $x^{1/2}$, т. е. одно из них имеет особенность, а другое равно нулю при $x=0$. Это та самая особенность решения ВКБ в классической точке поворота, которая не позволяет сформулировать граничное условие. Ее можно устранить, заменив в уравнении (117.7б) член $1/4x^2$ на $1/9x^2$. Другими словами, мы должны к коэффициенту при неизвестной функции в уравнениях (117.7б), (117.7а) и (117.7) добавить слагаемое $5/36x^2$. В результате уравнение ВКБ (117.7) изменится лишь в непосредственной близости от точки $x=0$, а во всей остальной области практически останется неизменным. Пусть функция $v(x)$ удовлетворяет этому новому дифференциальному уравнению, заменяющему собой уравнение ВКБ (117.7):

$$\ddot{v} + \frac{\dot{Q}}{Q} \dot{v} + \left[1 + \frac{5}{36x^2} - \frac{1}{4} \frac{\dot{Q}^2}{Q^2} + \frac{1}{2} \frac{\ddot{Q}}{Q}\right] v = 0. \quad (117.10)$$

Записав решение этого уравнения в форме, аналогичной выражению (117.3) или (117.5):

$$v(x) = Q^{-1/2} F(x), \quad (117.11)$$

мы приходим к уравнению

$$\ddot{F} + \left[1 + \frac{5}{36x^2} \right] F = 0, \quad (117.12)$$

общее решение которого имеет вид

$$v(x) = \sqrt{\frac{x}{Q}} \{C_1 J_{1/3}(x) + C_2 J_{-1/3}(x)\}. \quad (117.13)$$

Благодаря соотношению (117.8) это решение не имеет особенностей в точке $x=0$, а от решения ВКБ оно отличается лишь заменой функций $e^{\pm ix}$ функциями $\sqrt{x} J_{\pm 1/3}(x)$, которые асимптотически при $x \gg 1/3$ ведут себя как

$$\sqrt{x} J_{\pm 1/3}(x) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos\left(x - \frac{\pi}{4} \mp \frac{\pi}{6}\right). \quad (117.14)$$

Теперь мы можем перейти к формулировке граничного условия. Зная общее решение (117.13) для области $r > r_t$, где $Q > 0$ и $x > 0$, мы должны найти его продолжение в область $r < r_t$, где

$$Q = i|Q|, \quad x = e^{\frac{3i\pi}{2}} \xi, \quad \xi > 0. \quad (117.15)$$

Для малых значений комплексной переменной x имеют место равенства

$$J_{1/3}(x) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \left(\frac{x}{2}\right)^{1/3}, \quad J_{-1/3}(x) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \left(\frac{x}{2}\right)^{-1/3},$$

поэтому для чисто мнимых x , определяемых соотношением (117.15), должно быть

$$J_{1/3}(x) = \frac{i}{\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{1/3}, \quad J_{-1/3}(x) = -\frac{i}{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{-1/3}.$$

Для действительных положительных значений аргумента ξ так называемые модифицированные функции Бесселя $I_\nu(\xi)$, определяемые равенствами

$$J_{1/3}(x) = iI_{1/3}(\xi), \quad J_{-1/3}(x) = -iI_{-1/3}(\xi),$$

принимают действительные значения. Этим же свойством обладает и модифицированная функция Ханкеля,

$$K_\nu(\xi) = \frac{\pi}{2 \sin \nu\pi} [I_{-\nu}(\xi) - I_\nu(\xi)] = \frac{i\pi}{2} e^{\frac{i\nu\pi}{2}} H_\nu^{(1)}(i\xi),$$

асимптотика которой при больших положительных ξ имеет вид

$$K_\nu(\xi) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} e^{-\xi}. \quad (117.16)$$

Пользуясь этими математическими сведениями, мы можем записать общее решение (117.13) для значений аргумента x (117.15) следующим образом:

$$\begin{aligned} v(x) &= \left\{ e^{i\pi} \frac{\xi}{|Q|} \right\}^{1/2} \left\{ C_1 i I_{1/3}(\xi) - C_2 i I_{-1/3}(\xi) \right\} = \\ &= \sqrt{\frac{\xi}{|Q|}} \left\{ C_2 I_{-1/3}(\xi) - C_1 I_{1/3}(\xi) \right\}. \end{aligned}$$

В области потенциального барьера интересующее нас решение должно убывать по мере роста ξ наподобие функции (117.16), поэтому мы должны положить

$$C_1 = C_2 = C. \quad (117.17)$$

Таким образом, получаем

$$v(x) = \sqrt{\frac{\xi}{|Q|}} C \frac{2 \sin \frac{\pi}{3}}{\pi} K_{1/3}(\xi).$$

Эта формула позволяет зафиксировать относительную фазу решений ВКБ в области $x > 0$. Действительно, если теперь вернуться к равенствам (117.14) и (117.13), то в силу соотношения (117.17) получим

$$v(x) \rightarrow \sqrt{\frac{x}{Q}} C \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left\{ \cos \left(x - \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{6} \right) + \cos \left(x - \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{6} \right) \right\},$$

или

$$v(x) \rightarrow C \sqrt{\frac{6}{\pi Q}} \sin \left(x + \frac{\pi}{4} \right). \quad (117.18)$$

Этот результат асимптотически согласуется с решением ВКБ (117.3), если там определенным образом зафиксировать относительную фазу.

Замечание. Вопрос о решении вблизи классической точки поворота можно несколько упростить, воспользовавшись функциями Эйри (см. задачу 40).

Литература к задачам 113—115

- Wentzel G., Zs. Phys., 38, 518 (1926).
 Kramers H. A., Zs. Phys., 39, 828 (1926).
 Brillouin L., Cont. Rend. Acad. Sci., Paris, 183, 24 (1926).
 Langer R. E., Phys. Rev., 51, 669 (1937).

Задача 118. Гармонический осциллятор в приближении ВКБ

Найти энергетические уровни гармонического осциллятора, применив к волновым функциям ВКБ граничные условия Лангера.

Решение. В случае осцилляторного потенциала

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (118.1)$$

значению энергии

$$E = \frac{1}{2} m v^2, \quad (118.2)$$

где v — классическая скорость частицы при $x=0$, соответствуют классические точки поворота

$$x = \pm x_0, \quad x_0 = \frac{v}{\omega}. \quad (118.3)$$

Отсюда следует, что

$$Q^2 = k^2 \left(1 - \frac{V(x)}{E} \right) = k^2 \left(1 - \frac{x^2}{x_0^2} \right). \quad (118.4)$$

Волновая функция, найденная методом ВКБ и удовлетворяющая граничному условию Лангера в точке поворота $x = -x_0$, должна иметь вид

$$\tilde{u}(x) = Q^{-1/2} \cos \left\{ \int_{-x_0}^x Q(x) dx - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (118.5)$$

Подставляя сюда вместо функции $Q(x)$ ее выражение (118.4) и учитывая, что

$$kx_0 = \frac{mv}{\hbar} \cdot \frac{v}{\omega} = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

получаем

$$\tilde{u}(x) = Q^{-1/2} \cos \left\{ \frac{E}{\hbar\omega} \left[\arcsin \frac{x}{x_0} + \frac{x}{x_0} \sqrt{1 - \frac{x^2}{x_0^2}} + \frac{\pi}{2} \right] - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (118.6)$$

Теперь мы должны потребовать, чтобы это решение удовлетворяло граничному условию Лангера в другой точке поворота $x = x_0$. Таким образом, оно должно быть либо четной, либо нечетной функцией переменной x .

Вводя обозначения

$$y(x) = \frac{E}{\hbar\omega} \left[\arcsin \frac{x}{x_0} + \frac{x}{x_0} \sqrt{1 - \frac{x^2}{x_0^2}} \right], \quad (118.7)$$

$$\varphi = \frac{E}{\hbar\omega} \cdot \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4},$$

где функция $y(x)$, очевидно, нечетная [$y(-x) = -y(x)$], получаем

$$\tilde{u}(x) = Q^{-1/2} \cos \{ y(x) + \varphi \} = Q^{-1/2} \{ \cos y \cos \varphi - \sin y \sin \varphi \}.$$

Таким образом, если

$$\varphi = 2n \frac{\pi}{2}, \quad \tilde{u}_{2n}(x) = Q^{-1/2} (-1)^n \cos y, \quad (118.8a)$$

то решение \tilde{u} будет четной функцией; если же

$$\varphi = (2n + 1) \frac{\pi}{2}, \quad \tilde{u}_{2n+1}(x) = Q^{-1/2} (-1)^{n+1} \sin y, \quad (118.8b)$$

то \tilde{u} будет нечетной функцией. Оба ограничения на фазу φ можно объединить в одной формуле, полагая

$$\varphi = n \frac{\pi}{2}.$$

Отсюда, согласно соотношению (118.7), получаем

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (118.9)$$

Отрицательные значения n можно исключить из рассмотрения, так как они не удовлетворяют условию

$$E > V_{\text{мин}} = 0,$$

выполнение которого необходимо для применимости приближения ВКБ.

Чтобы составить представление о качестве приближения ВКБ для волновых функций, интересно сравнить расположение нулей функций ВКБ \tilde{u}_n и точных решений u_n , найденных в задаче 30. Соответствующие данные приведены в нижеследующей таблице:

| n | Значения x/x_0 для нулей функций | |
|-----|------------------------------------|--------------|
| | \tilde{u}_n | u_n |
| 0 | — | — |
| 1 | 0 | 0 |
| 2 | $\pm 0,320$ | $\pm 0,316$ |
| 3 | 0 | 0 |
| 4 | $\pm 0,466$ | $\pm 0,462$ |
| | $\pm 0,1754$ | $\pm 0,1750$ |
| | $\pm 0,553$ | $\pm 0,550$ |

Задача 119. Уровни ВКБ в однородном поле

Пользуясь методом ВКБ, получить энергетические уровни стационарных состояний в гравитационном поле

$$V(z) = mgz$$

над отражающей поверхностью ($z=0$). Результаты сравнить с точным решением, найденным в задаче 40.

Решение. Здесь имеются две классические точки поворота $z_1=0$ и $z_2=E/mg$. Условие Лангера для левой точки поворота¹⁾ $z_1=0$ дает

$$\tilde{u}(z) = Q^{-1/2} \cos \left\{ \int_0^z Q(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\}, \quad (119.1)$$

где

$$Q(z) = k \sqrt{1 - \frac{mg}{E} z}, \quad (119.2)$$

и после элементарного интегрирования получаем

$$\tilde{u}(z) = Q^{-1/2} \cos \left\{ \frac{2}{3} k z_2 \left[1 - \left(\frac{z}{z_2} \right)^{3/2} \right] - \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (119.3)$$

С другой стороны, условие Лангера должно выполняться и в точке $z=z_2$. Если ввести переменную $y=-z$, то она снова будет левой точкой поворота, поэтому

$$\begin{aligned} \tilde{u}(z) &= \pm Q^{-1/2} \cos \left\{ \int_{-z_0}^{-z} Q(-y) dy - \frac{\pi}{4} \right\} = \\ &= \pm Q^{-1/2} \cos \left\{ - \int_{z_2}^z Q(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\}, \end{aligned}$$

или

$$\tilde{u}(z) = \pm Q^{-1/2} \cos \left\{ \int_{z_2}^z Q(z) dz + \frac{\pi}{4} \right\}. \quad (119.4a)^2)$$

Так как равенство (119.1) в общем случае можно записать в виде

$$\tilde{u}(z) = Q^{-1/2} \cos \left\{ \int_{z_1}^z Q(z) dz - \frac{\pi}{4} \right\}, \quad (119.4б)$$

то аргументы косинусов в формулах (119.4а) и (119.4б) могут отличаться лишь на целое, кратное π :

$$\int_{z_1}^z Q(z) dz - \frac{\pi}{4} = \int_{z_2}^z Q(z) dz + \frac{\pi}{4} + n\pi,$$

¹⁾ В точке $x=0$ имеется непроницаемая стенка, поэтому вместо условия Лангера следовало бы положить $\psi(0)=0$. В этом случае формула (119.5) принимает вид

$$\int_0^{z_2} Q dz = \left(n + \frac{3}{4} \right) \pi.$$

— Прим. ред.

²⁾ Наличие двух знаков в этой формуле связано с тем, что при выводе формулы Лангера вопрос о знаке остается открытым, поскольку последняя не зависит от нормировки.

или

$$\int_{z_1}^{z_2} Q(z) dz = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi. \quad (119.5)$$

Такова общая формула, определяющая уровни энергии в приближении ВКБ. Применительно к частице в нашем гравитационном поле получаем

$$\frac{2}{3} k z_2 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi. \quad (119.6)$$

Выразив здесь величину k через энергию и положив $z_2 = E/mg$, окончательно найдем

$$E_n = \frac{1}{2} \left[3\pi \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^{2/3} \sqrt[3]{\hbar^2 m g^2}. \quad (119.7)$$

Эта формула согласуется с асимптотикой (40.14) точного решения.

Замечание. Формулу (119.5) нетрудно применить к гармоническому осциллятору, рассмотренному в задаче 118. В этом случае

$$\int_{-x_0}^{x_0} Q(x) dx = \frac{E}{\hbar\omega} \pi,$$

что сразу же приводит к формуле для уровней

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Задача 120. Проблема Кеплера в приближении ВКБ

Определить энергетические уровни частицы в кулоновском поле притяжения

$$V(r) = -\frac{e^2}{r},$$

применив метод ВКБ к радиальному волновому уравнению.

Решение. Условие квантования

$$\int_{r_1}^{r_2} Q(r) dr = \left(n_r + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (120.1)$$

где

$$Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [E - V_{\text{эфф}}(r)], \quad (120.2)$$

а $r_1 < r_2$ — две классические точки поворота, можно применять как при положительных, так и при отрицательных значениях энергии E . Под $V_{\text{эфф}}$ подразумевается потенциальная энергия, в которую включен центробежный член, где произведена замена

величины $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$ (см. задачу 121)¹⁾. В нашем случае

$$Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ -|E| + \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2 \left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{2mr^2} \right\}. \quad (120.3)$$

С помощью обозначений

$$k^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad \lambda = l + \frac{1}{2} \quad (120.4)$$

выражение (120.3) можно записать в виде

$$Q^2 = \frac{k^2}{r^2} (r-r_1)(r_2-r), \quad (120.5)$$

где точки поворота r_1 и r_2 определяются формулами

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{1}{k^2 a} \left\{ 1 - \sqrt{1 - (\lambda k a)^2} \right\}, \\ r_2 &= \frac{1}{k^2 a} \left\{ 1 + \sqrt{1 - (\lambda k a)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (120.6)$$

В этих обозначениях условие квантования приобретает вид

$$k \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{(r-r_1)(r_2-r)} \frac{dr}{r} = \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (120.7)$$

Вычисление интеграла (120.7) можно разбить на три этапа. Сначала с помощью замены переменной интегрирования

$$r = \frac{1}{2} (r_2 - r_1) x + \frac{1}{2} (r_2 + r_1)$$

квадратичная форма под знаком радикала приводится к диагональному виду. Затем с помощью второй подстановки

$$y = \sqrt{\frac{1-x}{1+x}}$$

подынтегральное выражение приводится к рациональному виду

$$k \frac{(r_2 - r_1)^2}{r_1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y^2}{(y^2 + 1)^2 (y^2 + \rho^2)} dy = \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \pi,$$

где

$$\rho^2 = \frac{r_2}{r_1}$$

И наконец, последний интеграл берется вычетами. Для этого путь интегрирования следует замкнуть полуокружностью бесконечно большого радиуса, расположенной в верхней полуплоскости комплексной переменной y , и учесть, что полюсы подынтегрального выражения находятся в точках $y = i\rho$ и $y = i$, причем последний является полюсом второго порядка. Окончательно получаем

$$\frac{\pi}{2} k r_1 \left(\sqrt{\frac{r_2}{r_1}} - 1 \right)^2 = \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (120.8)$$

¹⁾ По поводу строгого обоснования замены величины $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$ см. Соколов А. А., Тернов И. М., Квантовая механика и атомная физика, изд-во „Просвещение“, 1970, стр. 200. — Прим. ред.

Полагая $\lambda ka = t$, этот результат можно записать в виде

$$\frac{\lambda}{2t} [1 - \sqrt{1-t^2}] \left(\sqrt{\frac{1 + \sqrt{1-t^2}}{1 - \sqrt{1-t^2}}} - 1 \right)^2 = n_r + \frac{1}{2}.$$

После упрощений это дает

$$\lambda \frac{1-t}{t} = n_r + \frac{1}{2}. \quad (120.9)$$

Отсюда

$$t = \frac{\lambda}{n_r + \frac{1}{2} + \lambda},$$

или

$$ka = \frac{1}{n_r + \frac{1}{2} + \lambda},$$

и, следовательно, в силу равенства (120.4)

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{\left(n_r + \frac{1}{2} + \lambda\right)^2}. \quad (120.10)$$

Так как $\lambda = l + 1/2$, то этот результат совпадает с известной точной формулой для собственных значений, причем

$$n = n_r + l + 1 \quad (120.11)$$

есть главное квантовое число.

Замечание. Для получения этого результата весьма существенна сделанная нами замена в центробежном члене величины $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$. Это означает, что центробежный член даже для s -состояний не обращается в нуль. Если бы мы опустили указанный член и пользовались выражением

$$Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ -|E| + \frac{e^2}{r} \right\},$$

то в результате у нас получились бы полуцелые квантовые числа n . В этом нетрудно убедиться, учтя, что при $\lambda=0$ точки поворота, согласно (120.6), расположены в $r_1=0$ и $r_2=2/(k^2a)$ и что условие квантования (120.8) в данном случае приводит к равенству

$$\frac{\pi}{2} k (\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1})^2 = \frac{\pi}{ka} = \left(n_r + \frac{1}{2}\right) \pi.$$

Задача 121. Фазы ВКБ для свободного движения

Показать, что с помощью замены в выражении для радиальной волновой функции величины $l(l+1)$ на $(l+1/2)^2$ получается волновая функция, обладающая правильным асимптотическим поведением в случае свободного движения.

Решение. При свободном движении $V=0$, и в силу равенства (117.18) можно написать (нормировка произвольная)

$$\chi_l^{\text{ВКБ}} = \left(1 - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}\right)^{-1/4} \sin \left\{ k \int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}} dr + \frac{\pi}{4} \right\}, \quad (121.1)$$

где $\lambda^2 = l(l+1)$ и $r_t = \lambda/k$ — классическая точка поворота. При больших значениях r амплитудный множитель этой функции стремится к единице, и его можно опустить при обсуждении вопроса об ее асимптотическом поведении. Интеграл легко вычисляется, и мы получаем

$$\int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{r_t^2}{r^2}} dr = r_t \left[\sqrt{\frac{r^2}{r_t^2} - 1} + \arcsin \frac{r_t}{r} - \frac{\pi}{2} \right].$$

Разлагая последнее выражение по степеням $r_t/r \ll 1$, находим

$$r_t \left[\frac{r}{r_t} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r_t^2}{r^2}\right) + \frac{r_t}{r} + \dots - \frac{\pi}{2} \right] \rightarrow r - \frac{\pi}{2} r_t.$$

Таким образом, функция ВКБ при больших значениях r принимает вид

$$\chi_l^{\text{ВКБ}} \rightarrow \sin \left(kr - \frac{\pi}{2} kr_t + \frac{\pi}{4} \right) = \sin \left(kr - \frac{\pi}{2} \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \right). \quad (121.2)$$

С другой стороны, для точного решения при той же нормировке имеет место формула

$$\chi_l = j_l(kr) \rightarrow \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right). \quad (121.3)$$

Выражения (121.2) и (121.3) становятся тождественными при больших r , если положить

$$\lambda - \frac{1}{2} = l \quad \text{или} \quad \lambda = l + \frac{1}{2}, \quad (121.4)$$

что и означает замену в центробежном члене величины $l(l+1)$ на $(l + 1/2)^2$.

Задача 122. Вычисление фаз ВКБ

Показать, что асимптотическое значение фазы радиальной волновой функции ВКБ, определяемой условием Лангера (см. задачу 117), где предварительно сделана замена величины $l(l+1)$ на λ^2 ,

$$\lambda^2 = \left(l + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (122.1)$$

можно найти с помощью формулы

$$\delta_l = k \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}} dr - \int_{\lambda/k}^r \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}} dr \right\}, \quad (122.2)$$

т. е. как предел разности интегралов ВКБ при наличии рассеивающего потенциала и без него, причем в каждом случае нижним пределом интегрирования служит своя собственная точка поворота.

Решение. Лангеровское выражение для фазы δ_l следует из формулы (117.18), которая асимптотически при больших значениях r дает

$$\sin \left\{ k \int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}} dr + \frac{\pi}{4} \right\} \rightarrow \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right),$$

поэтому

$$\delta_l = k \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}} dr - r \right\} + \left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2}. \quad (122.3)$$

Тождественность выражений (122.2) и (122.3) легко показать, если учесть (см. задачу 121), что интеграл

$$\int_{\lambda/k}^r \sqrt{1 - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}} dr = \frac{\lambda}{k} \left[\sqrt{\frac{r^2}{(\lambda/k)^2} - 1} + \arcsin \frac{\lambda/k}{r} - \frac{\pi}{2} \right]$$

при больших значениях r стремится к выражению

$$\frac{\lambda}{k} \left[\frac{r}{\lambda/k} - \frac{\pi}{2} \right] = r - \frac{\lambda}{k} \cdot \frac{\pi}{2} = r - \frac{1}{k} \left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2}.$$

Подставляя это выражение вместо второго интеграла в формулу (122.2), мы убеждаемся, что она приводит к (122.3).

Задача 123. Расчет кулоновских фаз методом ВКБ

Определить в приближении ВКБ асимптотику парциальных волн в кулоновском поле. Полученные выражения сравнить с точными решениями.

Решение. Пользуясь обозначениями

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2, \quad \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} = \kappa, \quad l + \frac{1}{2} = \lambda, \quad (123.1)$$

асимптотическое выражение для точного решения (см. задачу 111) можно записать в виде

$$\chi_l \sim \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} - \kappa \ln 2kr + \eta_l \right), \quad (123.2)$$

где

$$\eta_l = \arg \Gamma(l + 1 + i\kappa). \quad (123.3)$$

С другой стороны, метод ВКБ приводит к результату

$$\chi_l \sim \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \quad (123.4)$$

где

$$\delta_l = \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \int_{r_l}^r \sqrt{k^2 - \frac{2\kappa k}{r} - \frac{\lambda^2}{r^2}} dr - \int_{l/k}^r \sqrt{k^2 - \frac{\lambda^2}{r^2}} dr \right\}. \quad (123.5)$$

Таким образом, мы должны показать, что формула (123.5) является аппроксимацией точного выражения

$$\delta_l = -\kappa \ln 2kr + \eta_l, \quad (123.6)$$

в котором величина η_l определяется равенством (123.3).

Переходя к новой переменной $x = kr$ и полагая

$$X = x^2 - 2\kappa x - \lambda^2,$$

можно написать

$$\delta_l = \lim_{x \rightarrow \infty} \left\{ \int_{x_l}^x \sqrt{X} \frac{dx}{x} - \int_{\lambda}^x \sqrt{x^2 - \lambda^2} \frac{dx}{x} \right\},$$

где

$$x_l = \kappa + \sqrt{\kappa^2 + \lambda^2}.$$

Учитывая теперь значение неопределенного интеграла

$$\int \sqrt{X} \frac{dx}{x} = \sqrt{X} - \kappa \ln(x - \kappa + \sqrt{X}) + \lambda \arcsin \frac{\kappa x + \lambda^2}{x \sqrt{\kappa^2 + \lambda^2}},$$

мы после подстановки пределов получаем

$$\delta_l = \lim_{x \rightarrow \infty} \left\{ \sqrt{X} - \sqrt{x^2 - \lambda^2} - \kappa \ln \frac{x - \kappa + \sqrt{X}}{\sqrt{\kappa^2 + \lambda^2}} + \right. \\ \left. + \lambda \left[\arcsin \frac{\kappa x + \lambda^2}{x \sqrt{\kappa^2 + \lambda^2}} - \arcsin \frac{\lambda}{x} \right] \right\}.$$

Предел нетрудно вычислить, разложив это выражение по степеням $1/x$. Окончательный результат имеет вид

$$\delta_l = -\kappa + \kappa \ln \sqrt{\kappa^2 + \lambda^2} + \lambda \arcsin \frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 + \lambda^2}} - \kappa \ln 2\kappa.$$

Таким образом, с учетом соотношения (123.6) мы можем сказать, что в приближении ВКБ

$$\eta_l = \kappa (\ln \kappa - 1) + \kappa f\left(\frac{\lambda}{\kappa}\right), \quad (123.7)$$

$$f(z) = \ln \sqrt{1 + z^2} + z \arcsin \frac{1}{\sqrt{1 + z^2}}.$$

Теперь нам осталось сравнить приближенное выражение ВКБ (123.7) с точным выражением (123.3).

В приведенной ниже таблице мы даем несколько числовых значений величины η_l для случая $\kappa = 2$.

| l | Значение η_l | |
|-----|-------------------|-------------------|
| | точное | в приближении ВКБ |
| 0 | 0,130 | 0,110 |
| 1 | 1,237 | 1,222 |
| 2 | 2,022 | 2,012 |
| 3 | 2,610 | 2,610 |
| 4 | 3,074 | 3,076 |

Вычисление значений η_l в приближении ВКБ производится непосредственно по формуле (123.7), что же касается вычисления величин η_l , определяемых формулой (123.3), то оно выполняется с помощью соотношений

$$\eta_l = \operatorname{arctg} \frac{\kappa}{l} + \eta_{l-1}, \quad (123.8a)$$

$$\eta_0 = \frac{\pi}{4} + \kappa (\ln \kappa - 1) - \frac{1}{12\kappa} - \frac{1}{360\kappa^3} \dots \quad (123.8b)$$

Заметим, что ряд (123.8b) быстро сходится при $\kappa > 2$.

Из таблицы видно, что результаты находятся в хорошем согласии между собой. В случае $l=0$, когда $z = \lambda/\kappa = 1/4 \ll 1$, выражение (123.7) можно разложить в ряд

$$\eta_0^{\text{ВКБ}} = \frac{\pi}{4} + \kappa (\ln \kappa - 1) - \frac{1}{8\kappa} + \frac{1}{192\kappa^3} \dots,$$

поэтому разность между этим выражением и точным выражением (123.8b) будет примерно равна

$$\eta_0^{\text{ВКБ}} - \eta_0 \approx -\frac{1}{24\kappa}.$$

С другой стороны, если $\lambda \gg \kappa$ и $\lambda \gg 1$, то из равенства (123.7) следует

$$(\eta_{l+1} - \eta_l)^{\text{ВКБ}} = \frac{\kappa}{\lambda} - \frac{\kappa}{2\lambda^2} + \frac{\kappa}{3\lambda^3} - \frac{\kappa^3}{3\lambda^3} \dots,$$

в то время как соответствующее точное выражение в силу (123.8a) можно записать в виде

$$(\eta_{l+1} - \eta_l)^{\text{точн}} = \frac{\kappa}{\lambda} - \frac{\kappa}{2\lambda^2} + \frac{\kappa}{4\lambda^3} - \frac{\kappa^3}{3\lambda^3} \dots$$

Разность двух приведенных выражений убывает как $\kappa/(12\lambda^3)$. Это значит, что при продолжении нашей таблицы ($l > 4$) мы не получим сколько-нибудь заметных различий между точными и приближенными значениями фаз.

Задача 124. Квазипотенциал

Вместо переменной r часто полезно ввести новую переменную

$$t = r \sqrt{1 - \frac{V}{E}} \quad (124.1)$$

(преобразование Сабатьера). Показать, что выражение для фазы ВКБ можно представить в виде простого интеграла по переменной t , в котором квазипотенциал

$$Q(t) = 2E \ln \frac{r(t)}{t} \quad (124.2)$$

по существу заменяет потенциал $V(r)$.

Решение. Если ввести величину

$$b = \frac{t + \frac{1}{2}}{k} \quad (124.3)$$

(прицельное расстояние), то, согласно формуле (122.2), выражение для фазы ВКБ можно записать в виде

$$\delta_t = k \lim_{r \rightarrow \infty} \left\{ \int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{b^2}{r^2}} dr - \int_b^r \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2}} dr \right\}, \quad (124.4)$$

где r_t — наибольший корень выражения, стоящего под радикалом в первом интеграле. Некоторое неудобство этой формулы состоит в том, что предел при $r \rightarrow \infty$ имеет лишь разность интегралов, сами же интегралы расходятся, а нижние пределы различны.

Эту трудность можно устранить, воспользовавшись преобразованием (124.1), в результате которого первый из интегралов (124.4) приводится к виду

$$\int_{r_t}^r \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{b^2}{r^2}} dr = \int_b^t \frac{d \ln r(t)}{dt} \sqrt{t^2 - b^2} dt. \quad (124.5)$$

Разумеется, это возможно лишь в том случае, если преобразованию $t = t(r)$ соответствует единственное обратное преобразование $r = r(t)$, т. е. если t представляет собой монотонную функцию r . Подставляя выражение (124.5) в формулу (124.4) и обозначая во втором интеграле переменную r через t , получаем

$$\delta_t = k \int_b^{\infty} \sqrt{t^2 - b^2} \left\{ \frac{d \ln r(t)}{dt} - \frac{1}{t} \right\} dt. \quad (124.6)$$

Последний интеграл еще более упрощается с помощью интегрирования по частям. С учетом тождества

$$\frac{d \ln r(t)}{dt} - \frac{1}{t} = \frac{d}{dt} \ln \frac{r(t)}{t}$$

окончательный результат принимает вид

$$\delta_l = -\frac{1}{2} k \int_b^{\infty} \frac{Q(t)}{E} \frac{t dt}{\sqrt{t^2 - b^2}}, \quad (124.7)$$

где функция $Q(t)$ определяется равенством (124.2).

Если $|V(r)| \ll E$, то функция $Q(t)$ лишь немного отличается от потенциала $V(r)$. В этом нетрудно убедиться, переписав равенство (124.2) в виде

$$Q(t) = -E \ln \left(1 - \frac{V(r)}{E} \right). \quad (124.8)$$

Отсюда в первом приближении следует, что $Q(t) = V(r)$. Заметим, кстати, что нули функции $Q(t)$ в точности совпадают с нулями функции $V(r)$.

Замечание. В работе Сабатьера [Sabatier P. G., Nuovo Cimento, 37, 1180 (1965)] введено преобразование (124.1). Метод квазипотенциала был развит в работе Вольмера и Крюгера [Vollmer G., Krüger H., Phys. Lett., 28A, № 2 (1968)]. Дополнительные подробности можно найти в статье Вольмера [Vollmer G., Zs. Phys., 226, 423 (1969)].

Е. Магнитное поле

Задача 125. Введение магнитного поля

Получить выражение для гамильтониана заряженной частицы при наличии магнитного поля и показать, что присутствие в уравнении Шредингера векторного потенциала не противоречит калибровочной инвариантности.

Решение. В классической механике показывается¹⁾, что при наличии магнитного поля, описываемого вектор-потенциалом \mathbf{A} , импульс \mathbf{p} любой частицы с зарядом e заменяется величиной

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad (125.1)$$

поэтому нерелятивистская функция Гамильтона имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}), \quad (125.2)$$

¹⁾ Это делается следующим образом. С помощью функции Гамильтона (125.2) находятся канонические уравнения движения, из которых затем исключается импульс, что в результате приводит к уравнению движения

$$m \ddot{\mathbf{r}} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} [\mathbf{v} \mathcal{B}] \right).$$

В правой части этого уравнения стоит правильное выражение для силы Лоренца действующей на частицу с зарядом e .

где Φ — скалярный потенциал электромагнитного поля, а $V(\mathbf{r})$ — потенциал, обусловленный силами неэлектромагнитного происхождения (например, ядерными силами). Соответствующий этому классическому выражению гамильтониан получается заменой вектора \mathbf{p} оператором $(\hbar/i)\nabla$. В результате мы получаем обобщенное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi,$$

где

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e\hbar}{2mc} (\nabla \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + e\Phi + V. \quad (125.3)$$

Так как

$$\nabla \cdot \mathbf{A}\psi = \psi \operatorname{div} \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \nabla \psi,$$

то последнее выражение можно упростить:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{e\hbar}{mc} i \left(\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{A} \right) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + e\Phi + V. \quad (125.4)$$

В классической теории Максвелла, кроме того, показывается, что векторный потенциал \mathbf{A} и скалярный потенциал Φ можно подвергнуть одновременному калибровочному преобразованию

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi, \\ \Phi &\rightarrow \Phi' = \Phi - \frac{1}{c} \dot{\chi}, \end{aligned} \quad (125.5)$$

где χ — произвольная функция координат и времени, при этом напряженности полей

$$\mathfrak{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad \mathfrak{E} = -\operatorname{grad} \Phi - \frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}} \quad (125.6)$$

останутся неизменными. Если физические явления определяются напряженностями полей, а не их потенциалами, то эта калибровочная инвариантность должна иметь место и в квантовой теории.

Если мы теперь просто подставим выражения (125.5) в гамильтониан (125.4), то это, разумеется, приведет к появлению целого ряда дополнительных членов, что нарушит калибровочную инвариантность уравнения Шредингера. Имеется единственная возможность избавиться от этих членов: для этого нужно, чтобы сама волновая функция участвовала в калибровочном преобразовании. Так как произведение $\psi^* \psi$ имеет непосредственный физический смысл, то оно, так же как и напряженности полей, не должно меняться при калибровочном преобразовании. Таким образом, это преобразование должно иметь вид

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha} \psi, \quad (125.7a)$$

где α — некоторая функция \mathbf{r} и t . При этом, очевидно, должно

быть

$$\begin{aligned}\nabla\psi' &= e^{i\alpha} \{ \nabla\psi + i\psi\nabla\alpha \}, \\ \nabla^2\psi' &= e^{i\alpha} \{ \nabla^2\psi + 2i\nabla\psi \cdot \nabla\alpha + i\psi\nabla^2\alpha - (\nabla\alpha)^2\psi \}, \\ \dot{\psi}' &= e^{i\alpha} \{ \dot{\psi} + i\dot{\alpha}\psi \}.\end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в гамильтониан (125.4) и заменяя там потенциалы \mathbf{A} и Φ потенциалами \mathbf{A}' и Φ' в соответствии с равенствами (125.5), получаем

$$\begin{aligned}e^{-i\alpha}H'\psi' &= -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \nabla^2\psi + 2i\nabla\alpha \cdot \nabla\psi + i\psi\nabla^2\alpha - (\nabla\alpha)^2\psi \} + \\ &+ \frac{e\hbar}{mc} i \left\{ \mathbf{A} \cdot \nabla\psi + i\psi\mathbf{A} \cdot \nabla\alpha + \nabla\chi \cdot \nabla\psi + i\psi\nabla\chi \cdot \nabla\alpha + \frac{1}{2}\psi(\nabla \cdot \mathbf{A}) + \right. \\ &\left. + \frac{1}{2}\psi\nabla^2\chi \right\} + \frac{e^2}{2mc^2} \{ \mathbf{A}^2 + 2\mathbf{A} \cdot \nabla\chi + (\nabla\chi)^2 \} \psi + \left(e\Phi - \frac{e}{c} \dot{\chi} \right) \psi + V\psi.\end{aligned}$$

Последнему выражению после перегруппировки членов можно придать вид

$$\begin{aligned}e^{-i\alpha}H'\psi' &= H\psi + \frac{e\hbar}{mc} i \nabla \left(\chi - \frac{\hbar c}{e} \alpha \right) \cdot \nabla\psi + \frac{e\hbar}{2mc} i \left\{ \nabla^2 \left(\chi - \frac{\hbar c}{e} \alpha \right) + \right. \\ &+ \frac{e^2}{mc^2} \mathbf{A} \cdot \nabla \left(\chi - \frac{\hbar c}{e} \alpha \right) \left. \right\} \psi + \frac{e^2}{2mc^2} \left\{ (\nabla\chi)^2 - 2\frac{\hbar c}{e} \nabla\chi \cdot \nabla\alpha + \frac{\hbar^2 c^2}{e^2} (\nabla\alpha)^2 \right\} \psi - \\ &- \frac{e}{c} \dot{\chi}\psi + V\psi.\end{aligned}$$

Дополнительные члены, фигурирующие в этом выражении, действительно взаимно сокращаются, если положить

$$\alpha = \frac{e}{\hbar c} \chi, \quad (125.76)$$

так что в результате мы приходим к равенству

$$e^{-i\alpha}H'\psi' = H\psi - \frac{e}{c} \dot{\chi}\psi.$$

Так как наше преобразование одновременно изменяет и левую часть уравнения Шредингера (125.3)

$$-\frac{\hbar}{i} e^{-i\alpha} \dot{\psi}' = -\frac{\hbar}{i} (\dot{\psi} + i\dot{\alpha}\psi) = -\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} - \frac{e}{c} \dot{\chi}\psi,$$

то последние члены в обеих частях уравнения (125.3) взаимно уничтожаются и оно будет выполняться для штрихованных величин так же, как и для нештрихованных. Этим и доказывается калибровочная инвариантность теории, если волновая функция ψ преобразуется согласно соотношениям (125.7а) и (125.7б).

Задача 126. Плотность тока в присутствии магнитного поля

Вывести формулу для плотности тока в случае уравнения Шредингера с векторным потенциалом. Доказать, что плотность тока калибровочно инвариантна.

Решение. В задаче 1 был получен закон сохранения вероятности. При выводе этого закона мы исходили из уравнения Шредингера и уравнения, комплексно сопряженного с уравнением Шредингера, и строили с их помощью уравнение непрерывности. В этой задаче мы поступим аналогичным образом и начнем с уравнений

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{e\hbar}{mc} i \left(\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{A} \right) \psi + \left(\frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + e\Phi + V \right) \psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (126.1a)$$

и

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* - \frac{e\hbar}{mc} i \left(\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{A} \right) \psi^* + \left(\frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 + e\Phi + V \right) \psi^* = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t}. \quad (126.1b)$$

Умножая уравнения (126.1a) и (126.1b) соответственно на ψ^* и ψ и вычитая их одно из другого, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) + \frac{e\hbar}{mc} i \{ \mathbf{A} \cdot \nabla (\psi^* \psi) + \psi^* \psi \operatorname{div} \mathbf{A} \} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi).$$

Так как далее

$$\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* = \operatorname{div} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

и

$$\mathbf{A} \cdot \nabla (\psi^* \psi) + \psi^* \psi \operatorname{div} \mathbf{A} = \operatorname{div} (\mathbf{A} \psi^* \psi),$$

то левую часть этого уравнения можно представить в виде дивергенции некоторого вектора. Таким образом, сохраняя прежнее определение плотности вероятности

$$\rho = \psi^* \psi, \quad (126.2)$$

мы приходим к уравнению непрерывности

$$\operatorname{div} \mathbf{s} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (126.3)$$

в котором плотность тока вероятности \mathbf{s} имеет вид

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* - 2i \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} \psi^* \psi \right). \quad (126.4)$$

Последняя формула является обобщением формулы (1.6), выведенной ранее для случая $\mathbf{A} = 0$.

Выполняя калибровочное преобразование, рассмотренное в предыдущей задаче,

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi, \quad \psi' = e^{i\alpha} \psi, \quad \alpha = \frac{e}{\hbar c} \chi, \quad (126.5)$$

находим

$$\begin{aligned} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)' &= \psi^* (\nabla \psi + i \psi \nabla \alpha) - \psi (\nabla \psi^* - i \psi^* \nabla \alpha) = \\ &= (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) + 2i \psi^* \psi \nabla \alpha \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} -2i \frac{e}{\hbar c} (A \psi^* \psi)' &= -2i \frac{e}{\hbar c} (A \psi^* \psi + \psi^* \psi \nabla \chi) = \\ &= -2i \frac{e}{\hbar c} A \psi^* \psi - 2i \psi^* \psi \nabla \alpha. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что плотность тока вероятности (126.4) калибровочно инвариантна. Очевидно, что определяемая равенством (126.2) плотность вероятности ρ также калибровочно инвариантна, следовательно, этим же свойством обладает и сам закон сохранения.

Задача 127. Нормальный эффект Зеемана

На электрон, помещенный в центральное поле, дополнительно воздействует однородное магнитное поле \mathcal{H} . Определить стационарные состояния электрона. Спин электрона не учитывать.

Решение. В пренебрежении релятивистскими эффектами дифференциальное уравнение для стационарных состояний электрона с зарядом $-e$ имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u - \frac{e\hbar}{mc} i (\mathbf{A} \cdot \nabla) u + Vu = Eu, \quad (127.1)$$

причем выше мы воспользовались калибровкой $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ и опустили член, пропорциональный \mathbf{A}^2 . В случае однородного поля \mathcal{H} , направленного вдоль оси z , мы можем удовлетворить условию калибровки, положив

$$A_x = -\frac{1}{2} \mathcal{H} y, \quad A_y = \frac{1}{2} \mathcal{H} x, \quad A_z = 0, \quad (127.2)$$

при этом

$$\mathbf{A} \cdot \nabla u = \frac{1}{2} \mathcal{H} \left(x \frac{\partial u}{\partial y} - y \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{1}{2} \mathcal{H} \frac{\partial u}{\partial \phi}, \quad (127.3)$$

и уравнение (127.1) можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u - \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} i \frac{\partial u}{\partial \phi} + Vu = Eu. \quad (127.4)$$

Заметим, что член, содержащий магнитное поле, можно переписать несколько по-иному:

$$\frac{e}{2mc} \mathcal{H} \cdot \mathbf{L}, \quad (127.5)$$

где \mathbf{L} — оператор момента количества движения, z -компонента

которого равна

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Согласно максвелловской теории электромагнетизма, движущаяся частица с зарядом $-e$ и моментом количества движения \mathbf{L} порождает магнитное поле, обусловленное дипольным магнитным моментом

$$\mathbf{M} = \frac{-e}{2mc} \mathbf{L}, \quad (127.6)$$

поэтому величину (127.5) можно записать в виде $-\mathbf{M} \cdot \mathcal{H}$. Последнее выражение представляет собой, на самом деле, хорошо известную потенциальную энергию диполя \mathbf{M} в магнитном поле \mathcal{H} .

Решение дифференциального уравнения (127.4) можно искать в виде

$$u = f_l(r) Y_{l, \mu}(\vartheta, \varphi), \quad (127.7)$$

тогда член, содержащий магнитное поле, даст в уравнение вклад

$$\frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \mu \cdot u,$$

и вместо (127.4) теперь можно написать

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u + V u = \left(E - \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \mu \right) u. \quad (127.8)$$

Это уравнение по форме совпадает с дифференциальным уравнением для случая $\mathcal{H} = 0$. Отсюда следует, что под действием магнитного поля энергетические уровни расщепляются:

$$E_{n, l, \mu} = E_{n, l}^0 + \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \mu. \quad (127.9)$$

Здесь через $E_{n, l}^0$ обозначены собственные значения для случая $\mathcal{H} = 0$. Учитывая, что $\hbar \mu = L_z$, и принимая во внимание равенство (127.6), последнее соотношение можно преобразовать к виду

$$E_{n, l, \mu} = E_{n, l}^0 - \mathbf{M} \cdot \mathcal{H}, \quad (127.10)$$

что и следовало ожидать исходя из классических соображений.

Характерный магнитный момент $e\hbar/(2mc)$ называют *магнетонном Бора*, а квантовое число μ — *магнитным квантовым числом*. В рассматриваемом случае система собственных состояний та же самая, что и при $\mathcal{H} = 0$, но магнитное поле уничтожает пространственное вырождение энергетических уровней.

Замечание. Формулу (127.9), определяющую уровни энергии, можно получить, рассматривая оператор магнитной энергии (127.5)

$$W_{\text{mag}} = \frac{e}{2mc} \mathcal{H} L_z \quad (127.11)$$

в качестве возмущения. В первом порядке теории возмущений сдвиг уровней определяется диагональным матричным элементом оператора $W_{\text{маг}}$, вычисленным по невозмущенным собственным функциям:

$$\begin{aligned} \Delta E_{n, l, \mu} &= \langle n, l, \mu | W_{\text{маг}} | n, l, \mu \rangle = \frac{e}{2mc} \mathcal{H} \int u_{n, l, \mu}^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} u_{n, l, \mu} d^3x = \\ &= \frac{e}{2mc} \mathcal{H} \hbar \mu. \end{aligned} \quad (127.12)$$

Совпадение приближенного результата с точной формулой (127.9) объясняется тем, что волновые функции нулевого приближения в интеграле (127.12) совпадают с точными решениями уравнения (127.4). В связи с вопросом о правилах отбора см. задачу 216.

Задача 128. Парамагнитная и диамагнитная восприимчивости без учета спина

Вычислить парамагнитную и диамагнитную восприимчивости на один связанный электрон, находящийся в центральном поле. Спин электрона не учитывать.

Решение. Пусть на рассматриваемый атомный электрон, движение которого описывается гамильтонианом H_0 , дополнительно действует магнитное поле $\mathcal{H} \parallel z$. Выбирая калибровку, при которой дивергенция вектор-потенциала обращается в нуль, получаем

$$H = H_0 - \frac{e\hbar}{mc} i \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2. \quad (128.1)$$

Чтобы удовлетворить условию калибровки, положим

$$A_x = -\frac{1}{2} \mathcal{H} y, \quad A_y = \frac{1}{2} \mathcal{H} x, \quad A_z = 0, \quad (128.2)$$

тогда

$$H = H_0 + \frac{e\hbar}{mc} i \frac{\mathcal{H}}{2} \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{e^2}{2mc^2} \cdot \frac{\mathcal{H}^2}{4} (x^2 + y^2)$$

или

$$H = H_0 + \frac{e\mathcal{H}}{2mc} L_z + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} r^2 \sin^2 \vartheta. \quad (128.3)$$

Магнитная энергия в состоянии $|n\rangle$ (посредством n обозначена вся совокупность квантовых чисел, характеризующих одноэлектронное состояние) с точностью до членов второго порядка равна

$$\Delta E_n = \langle n | \frac{e\mathcal{H}}{2mc} L_z + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} r^2 \sin^2 \vartheta | n \rangle + \sum_{n'}' \frac{|\langle n' | \frac{e\mathcal{H}}{2mc} L_z | n \rangle|^2}{E_n - E_{n'}}. \quad (128.4)$$

Пусть далее все атомы вещества находятся в основном состоянии (такое предположение действительно разумно, так как энер-

гия возбуждения, как правило, составляет несколько электрон-вольт, что значительно больше тепловой энергии). Допустим, что в этом основном состоянии рассматриваемый электрон обладает орбитальным моментом $\hbar l$ и, следовательно, может иметь различные значения проекции момента $\hbar m_l$ на направление магнитного поля. В этом случае первый член формулы (128.4) даст в магнитную энергию (отнесенную к одному электрону) вклад вида

$$E^{(1)} = \frac{e\mathcal{H}}{2mc} \hbar m_l. \quad (128.5)$$

В состоянии теплового равновесия число электронов с проекцией момента $\hbar m_l$ пропорционально, согласно Больцману, $\exp\{-E^{(1)}/kT\}$, поэтому средняя магнитная энергия, приходящаяся на один электрон, будет равна

$$\overline{E^{(1)}} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \frac{\sum_{m_l=-l}^{+l} m_l e^{-\alpha m_l}}{\sum_{m_l=-l}^{+l} e^{-\alpha m_l}}, \quad (128.6)$$

где

$$\alpha = \frac{e\hbar}{2mc} \frac{\mathcal{H}}{kT}.$$

Безразмерная величина α для всех разумных значений напряженности поля \mathcal{H} значительно меньше единицы, и фигурирующие выше экспоненты можно разложить в ряд. Таким образом, имеем

$$\frac{\sum m_l e^{-\alpha m_l}}{\sum e^{-\alpha m_l}} = \frac{\sum \left(m_l - \alpha m_l^2 + \frac{1}{2} \alpha^2 m_l^3 \dots \right)}{\sum \left(1 - \alpha m_l + \frac{1}{2} \alpha^2 m_l^2 \dots \right)}.$$

Все эти суммы симметричны относительно $m_l = 0$, поэтому суммы, содержащие нечетные степени m_l , обращаются в нуль, и мы можем написать

$$\frac{-\alpha \sum m_l^2 + O(\alpha^3)}{\sum 1 + O(\alpha^2)} = -\alpha \frac{\frac{1}{6} l(l+1)(2l+1) + \dots}{(2l+1) + \dots},$$

причем здесь мы опустили члены порядка α^2 и выше. Отсюда для плотности магнитной энергии получаем

$$\overline{E^{(1)}} N = -N \frac{e\hbar}{2mc} \mathcal{H} \left(\frac{e\hbar}{2mc} \frac{\mathcal{H}}{kT} \right) \frac{1}{6} l(l+1), \quad (128.7)$$

где N — число электронов с моментом l в 1 см³. Следует заметить, что плотность энергии пропорциональна квадрату напря-

женности поля, хотя исходная энергия $E^{(1)}$ зависела от поля линейно.

Второй член формулы (128.4)

$$E^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} \langle n | r^2 \sin^2 \vartheta | n \rangle \quad (128.8)$$

оказывается (см. ниже) значительно меньше, чем $E^{(1)}$, поэтому он не играет большой роли в тех случаях, когда первый член отличен от нуля. Эти же соображения относятся и к третьему члену формулы (128.4). Таким образом, для всех $l > 0$ магнитные свойства вещества определяются первым членом, в случае же $l=0$ эти свойства определяются энергией $E^{(2)}$. Так как

$$\frac{1}{4\pi} \oint \sin^2 \vartheta d\Omega = \frac{2}{3},$$

то мы можем написать

$$E^{(2)} = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{12mc^2} \langle 0 | r^2 | 0 \rangle, \quad (128.9)$$

где $|0\rangle$ означает волновую функцию, соответствующую основному s -состоянию, а $\langle 0 | r^2 | 0 \rangle$ — среднее значение r^2 в этом состоянии. В данном случае необходимость в температурном усреднении отпадает. Первый и третий члены формулы (128.4) в случае s -состояния обращаются в нуль, так как $L_z |0\rangle = 0$, поэтому теперь их можно не рассматривать.

Согласно электродинамике Максвелла, изменение поля \mathcal{H} на $\delta\mathcal{H}$ приводит к изменению плотности магнитной энергии:

$$\delta E = -\mathcal{M} \delta \mathcal{H}, \quad (128.10)$$

где \mathcal{M} — так называемая намагниченность, т. е. магнитный дипольный момент l см³ вещества, индуцированный полем \mathcal{H} . Предполагается, что она пропорциональна полю \mathcal{H} :

$$\mathcal{M} = \chi \mathcal{H}. \quad (128.11)$$

Коэффициент пропорциональности χ называется магнитной восприимчивостью. Комбинируя соотношения (128.10) и (128.11), получаем

$$\delta E = -\chi \mathcal{H} \delta \mathcal{H},$$

и, следовательно, плотность магнитной энергии будет равна

$$E = -\frac{1}{2} \chi \mathcal{H}^2. \quad (128.12)$$

Если χ — положительная величина, то мы говорим о парамагнетизме, если χ — отрицательная величина, то — о диамагнетизме.

Макроскопическое выражение (128.12) для плотности магнитной энергии мы должны отождествить либо с выражением (128.7), если $l \neq 0$, либо с умноженным на N выражением (128.9), если

$l=0$. В первом случае мы имеем дело с парамагнетизмом, причем

$$\chi_{\text{пара}} = \frac{1}{3} N \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right)^2 \frac{l(l+1)}{kT}, \quad (128.13)$$

во втором же случае

$$\chi_{\text{диа}} = -N \frac{e^2}{6mc^2} \langle 0 | r^2 | 0 \rangle, \quad (128.14)$$

и, следовательно, мы имеем дело с диамагнетизмом.

Как и следовало ожидать, формула (128.13) совпадает с классической формулой Ланжевена, полученной усреднением по ориентациям постоянного дипольного момента

$$\mu = \frac{e}{2mc} L. \quad (128.15)$$

Диамагнитная восприимчивость значительно меньше парамагнитной восприимчивости, поэтому ее можно не учитывать при рассмотрении парамагнитных веществ. В этом можно убедиться, оценив отношение

$$\frac{\chi_{\text{пара}}}{\chi_{\text{диа}}} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m \langle r^2 \rangle} \left| kT. \quad (128.16) \right.$$

Фактически это есть отношение вращательной и тепловой энергий электрона. Первая из них составляет несколько электрон-вольт, вторая по порядку величины равна 0,03 эВ при комнатной температуре¹⁾.

¹⁾ Величина $\langle r^2 \rangle$ по порядку совпадает с квадратом боровского радиуса $(\hbar^2/me^2)^2$. Полагая для оценки в числителе отношения (128.16) $l=1$, находим, что он равен $me^4/\hbar^2 = 27,2$ эВ.