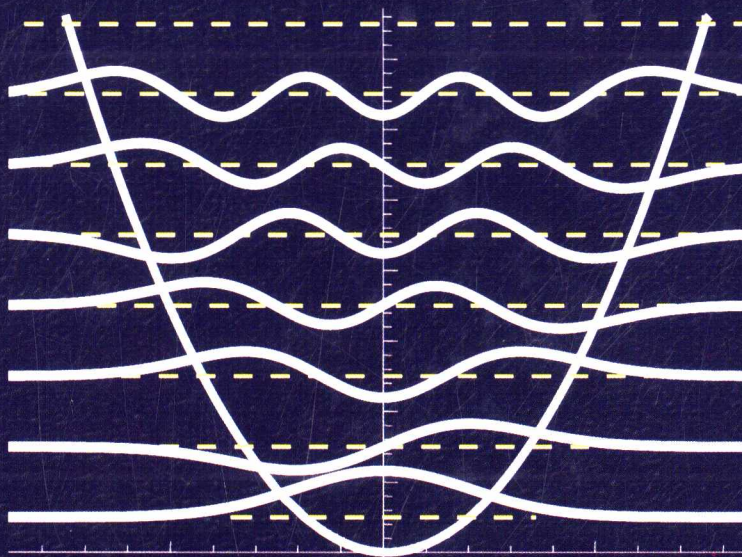


22.36.47  
113  
В.І.Висоцький

# КВАНТОВА МЕХАНІКА

ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ  
В ПРИКЛАДНІЙ ФІЗИЦІ



КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

**В.І. ВИСОЦЬКИЙ**

**КВАНТОВА МЕХАНІКА  
ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ  
У ПРИКЛАДНІЙ ФІЗИЦІ**

**Підручник**

*Затверджено  
Міністерством освіти і науки України  
як підручник для студентів  
вищих навчальних закладів,  
які навчаються за напрямом "Прикладна фізика"*

НБ ПНУС



778701



УДК 530.145(075.8)  
ББК 22.31я73  
В93

Рецензенти:

чл.-кор. НАН України, д-р фіз.-мат. наук, проф. Е.Г.Петров,  
д-р фіз.-мат. наук, проф. В.М.Павлович,  
д-р фіз.-мат. наук, проф. С.М.Єжов

*Затверджено до друку Вченою радою  
Київського національного університету імені Тараса Шевченка  
5 березня 2007 року*

**Висоцький, В.І.**

В93 Квантова механіка та її використання у прикладній фізиці : підручник / В.І. Висоцький. – К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2008. – 367 с.

ISBN 978-966-439-127-3

Подано логічно послідовний і структурований виклад квантової механіки в обсязі, достатньому як для безпосереднього практичного використання у прикладній фізиці, так і для вивчення інших навчальних дисциплін, де задіяні апарат, методи та ідеї квантової теорії. Приділено значну увагу питанням, які традиційно при першому вивченні квантової механіки не розглядаються, проте є дуже актуальними при дослідженні сучасних проблем прикладної фізики, а саме: метод матриці густини, теорія та особливості спонтанного випромінювання квантових систем, специфіка корельованих і когерентних станів, релятивістські рівняння Клейна – Гордона – Фока та Дірака тощо.

Для студентів, які навчаються за фахом загальної і прикладної фізики, а також аспірантів, науковців і викладачів, що займаються науковою та педагогічною діяльністю в цих галузях.

УДК 530.145(075.8)  
ББК 22.31я73

Гриф надано Міністерством освіти і науки України  
(лист № 1.4/18-Г-1491 від 23.06.08)

КІІА 02125206  
НАУКОВА БІБЛІОТЕКА  
ІНВ. № 77 87 01

ISBN 978-966-439-127-3

© Висоцький В.І., 2008  
© Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
ВПЦ "Київський університет", 2008

## З М І С Т

Передмова .....	9
<b>Розділ I. ІДЕЙНІ ПЕРЕДУМОВИ ТА БАЗОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ</b> .....	13
<b>§ 1. Історія та передумови виникнення квантової механіки</b> .....	13
<b>§ 2. Статистичний характер явищ мікросвіту</b> .....	24
2.1. Статистична інтерпретація хвильової функції .....	24
2.2. Середні значення фізичних величин у системах, стан яких описується хвильовою функцією. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга.....	32
<b>§ 3. Стационарне рівняння Шредингера та принципи його розв'язання</b> .....	40
3.1. Стационарне рівняння Шредингера .....	40
3.2. Частинка в нескінченно глибокій одномірній прямокутній потенціалній ямі .....	43
3.3. Тунельний ефект .....	45
<b>§ 4. Гармонічний осцилятор у класичній і квантовій механіці</b> .....	51
4.1. Класична теорія гармонічного осцилятора .....	51
4.2. Квантова теорія гармонічного осцилятора .....	54
4.3. Нульова енергія гармонічного осцилятора і співвідношення невизначеностей Гейзенберга .....	61
<b>Розділ II. ФОРМАЛЬНИЙ АПАРАТ ОПИСУ СТАЦИОНАРНИХ І НЕСТАЦИОНАРНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ</b> .....	63
<b>§ 5. Постулати квантової механіки. Загальні співвідношення невизначеностей Гейзенберга – Робертсона та Шредингера – Робертсона</b> .....	63
5.1. Постулати квантової механіки .....	63
5.2. Рівняння для визначення власних функцій і власних значень операторів фізичних величин.....	69
5.3. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга – Робертсона для довільних фізичних величин.....	72
5.4. Співвідношення невизначеностей Шредингера – Робертсона для довільних фізичних величин. Корельовані стани фізичної системи .....	75
<b>§ 6. Нестационарне рівняння Шредингера та еволюція характеристик квантової системи</b> .....	80

6.1. Нестационарне рівняння Шредінгера.....	80
6.2. Рівняння неперервності та закон збереження кількості частинок у квантовій механіці .....	84
6.3. Рівняння руху для операторів фізичних величин .....	86
6.4. Теорема Еренфеста. Квантові рівняння Ньютона .....	88
6.5. Інтеграли руху у квантовій механіці .....	90
<b>Розділ III. РУХ ЧАСТИНОК У ПОЛІ ЦЕНТРАЛЬНОЇ СИЛИ .....</b>	<b>95</b>
<b>§ 7. Рух частинки в полі центральної сили.</b>	
<b>Рівняння Шредінгера та радіальний рух електрона в атомі..</b>	<b>95</b>
7.1 Загальний розв'язок рівняння Шредінгера для кутової частини хвильової функції в полі центральної сили .....	95
7.2. Рух електрона в кулонівському полі ядра .....	99
<b>§ 8. Рух частинки в полі центральної сили.</b>	
<b>Водневоподібні системи та магнітні властивості атома .....</b>	<b>108</b>
8.1. Урахування впливу мас взаємодіючих частинок на їх рух і спектр рівнів енергії в полі центральної сили.....	108
8.2. Вплив маси атома і частоти переходів між рівнями його енергії на спектр частот випромінювання та поглинання .....	112
8.3. Особливості спектра оптичних переходів лужних металів ..	114
8.4. Коливальні та обертальні стани двоатомної молекули .....	117
8.5. Електричний струм у атомі та орбітальний магнітний момент атома .....	119
<b>Розділ IV. ТЕОРІЯ ПРЕДСТАВЛЕНЬ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ .....</b>	<b>123</b>
<b>§ 9. Теорія представлень для стаціонарних систем. Матричний формалізм у квантовій механіці .....</b>	<b>123</b>
9.1. Хвильова функція фізичної системи в довільному представленні .....	123
9.2. Оператор фізичної величини в довільному представленні .....	127
9.3. Середнє значення фізичної величини в довільному представленні .....	131
9.4. Визначення власних функцій і власних значень у матричному представленні .....	131
<b>§ 10. Теорія представлень для нестационарних систем .....</b>	<b>133</b>
10.1. Нестационарне рівняння Шредінгера в матричному вигляді .....	133
10.2. Рівняння руху для операторів у матричній формі .....	135

10.3. Представлення Шредінгера.....	136
10.4. Представлення Гейзенберга .....	138
10.5. Представлення взаємодії.....	139
10.6. Представлення вторинного квантування (представлення чисел заповнення) .....	140
<b>Розділ V. СПІН І СПІН-ЗАЛЕЖНІ ПРОЦЕСИ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ .....</b>	<b>145</b>
<b>§ 11. Передумови введення, модель і оператор спіну електрона .....</b>	<b>145</b>
11.1. Експериментальні передумови введення спіну .....	145
11.2. Гіпотеза та початкова модель спіну електрона .....	149
11.3. Оператор спіну електрона.....	150
<b>§ 12. Хвильове рівняння для електрона з урахуванням спіну за наявності електромагнітного поля .....</b>	<b>154</b>
12.1. Рівняння Паулі .....	154
12.2. Рівняння неперервності та вектор густини струму ймовірності за наявності спіну електрона .....	155
12.3. Атомний електрон у помірно сильному магнітному полі. Нормальний ефект Зеемана .....	158
<b>§ 13. Спін-орбітальний зв'язок у атомах. Симетрія хвильової функції.....</b>	<b>162</b>
13.1. Спін-орбітальний зв'язок у атомах.....	162
13.2. Тотожності мікрочастинок і принцип Паулі .....	167
13.3. Хвильова функція системи ферміонів і бозонів.....	172
<b>§ 14. Статистична модель атома Томаса – Фермі .....</b>	<b>173</b>
14.1. Особливості системи вільного виродженого фермі-газу .....	173
14.2. Розподіл виродженого фермі-газу електронів у полі атомного ядра та самоузгоджене рівняння стану .....	175
<b>Розділ VI. НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ .....</b>	<b>181</b>
<b>§ 15. Наближені методи розв'язання задач квантової механіки. Метод квазікласичного наближення (метод Вентцеля – Крамерса – Бріллюена).....</b>	<b>181</b>
15.1. Хвильова функція у квазікласичному наближенні .....	181
15.2. Правило квантування у квазікласичному наближенні ...	187
<b>§ 16. Прямий варіаційний метод наближеного розв'язання задач квантової механіки в одно- та багаточастинкових системах .....</b>	<b>189</b>
16.1. Прямий варіаційний метод Рітца .....	189



16.2. Методи Хартрі та Хартрі – Фока для визначення хвильових функцій і рівнів енергії в самоузгодженому потенціалі багаточастинкової системи.....	194
<b>§ 17. Стационарна теорія збурень</b> .....	197
17.1. Стационарна теорія збурень за відсутності виродження квантової системи.....	197
17.2. Стационарна теорія збурень за наявності виродження квантової системи.....	201
<b>§ 18. Застосування стационарної теорії збурень. Теорія збурень для випадку неперервного спектра. Ефект Штарка</b> .....	204
18.1. Теорія збурень для вільного руху частинки.....	204
18.2. Ефект Штарка.....	207
<b>§ 19. Нестационарна теорія збурень</b> .....	213
19.1. Адіабатичні та миттєві збурення.....	211
19.2. Переходи, викликані гармонічним збуренням квантової системи.....	215
<b>§ 20. Переходи у квантовій системі під дією гармонічного резонансного збурення довільної амплітуди. Прецесія Рабі</b> .....	218
<b>§ 21. Взаємодія атома з рухомою класичною зарядженою частинкою</b> .....	224
21.1. Кулонівське збудження атома електричним полем рухомої важкої класичної зарядженої частинки.....	224
21.2. Гальмування важкої класичної зарядженої частинки через втрати на взаємодію з атомами.....	230
21.3. Особливості взаємодії частинки з магнітним зарядом і атомами.....	231
<b>Розділ VII. ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ КВАНТОВИХ СИСТЕМ З ЕЛЕКТРОМАГНІТНИМИ ХВИЛЯМИ</b> .....	235
<b>§ 22. Взаємодія квантових систем з електромагнітними хвилями</b> .....	235
22.1. Переходи у квантовій системі, викликані випромінюванням з довільною довжиною хвилі....	235
22.2. Дипольне наближення при взаємодії електромагнітного випромінювання з атомними системами.....	238

<b>§ 23. Правила відбору для поглинання та випромінювання світла в атомах і квантових системах. Мультипольні переходи</b> .....	242
23.1. Правила відбору для дипольних переходів у атомах.....	242
23.2. Правила відбору для переходів вищої мультипольності..	245
<b>§ 24. Фотоефект у атомних системах</b> .....	251
<b>Розділ VIII. ТЕОРІЯ СПОНТАННОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ КВАНТОВИХ СИСТЕМ</b> .....	257
<b>§ 25. Теорія спонтанного випромінювання атомів у обмежених системах</b> .....	257
25.1. Електромагнітне поле як фізичний об'єкт з квантовими характеристиками.....	257
25.2. Динаміка процесу взаємодії квантованого електромагнітного поля з атомом.....	261
25.3. Взаємодія збудженого атома з кількома резонансними модами електромагнітного поля.....	266
<b>§ 26. Спонтанний розпад атомів у вільному просторі</b> .....	273
26.1. Особливості спонтанного розпаду збудженого стану при взаємодії атома з квазінеперервним розподілом мод поля у вакуумному стані.....	273
26.2. Порівняльний аналіз процесів взаємодії атома з дискретним і квазінеперервним ансамблями мод квантованого електромагнітного поля в основному (вакуумному) стані.....	280
26.3. Спонтанне випромінювання та вимушені переходи у квантових системах.....	287
<b>Розділ IX. ОСНОВИ ТЕОРІЇ РОЗСИЮВАННЯ</b> .....	291
<b>§ 27. Основи теорії розсіювання при взаємодії частинок</b> ...	291
27.1. Постановка задачі про зіткнення частинок.....	291
27.2. Борнівське наближення в теорії розсіювання.....	294
<b>Розділ X. МЕТОД МАТРИЦІ ГУСТИНИ ТА ЙОГО ВИКОРИСТАННЯ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ</b> .....	299
<b>§ 28. Метод матриці густини у квантовій механіці</b> .....	299
28.1. Чисті та змішані стани квантової системи. Матриця густини.....	299
28.2. Рівняння руху для матриці густини.....	304
<b>§ 29. Релаксація матриці густини. Самоузгоджена система для електромагнітного поля та речовини в наближенні матриці густини</b> .....	307
29.1. Релаксація матричних елементів матриці густини.....	307

29.2. Система самоузгоджених рівнянь для матриці густини та електромагнітного поля .....	311
<b>Розділ XI. РЕЛЯТИВІСТСЬКІ СИСТЕМИ ТА РІВНЯННЯ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ .....</b>	<b>314</b>
<b>§ 30. Релятивістські рівняння квантової механіки .....</b>	<b>314</b>
30.1. Релятивістські ефекти як збурення нерелятивістських систем.....	314
30.2. Релятивістське рівняння Клейна – Гордона – Фока.....	318
<b>§ 31. Рівняння Дірака.....</b>	<b>324</b>
31.1. Стаціонарне та нестационарне рівняння Дірака.....	324
31.2. Рівняння неперервності та вектор густини струму для частинок Дірака.....	327
31.3. Нерелятивістське наближення рівняння Дірака. Спін .....	329
<b>§ 32. Рух частинки Дірака у вільному просторі   та в полі ядра .....</b>	<b>334</b>
32.1. Вільний рух частинки Дірака.....	334
32.2. Рух діраківського електрона в полі ядра .....	337
<b>Розділ XII. ВИБРАНІ ПРИКЛАДНІ ЗАДАЧІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ....</b>	<b>340</b>
<b>§ 33. Кореляція інтенсивностей хвиль де Бройля   і тривимірна локація просторового положення   джерела мікрочастинок .....</b>	<b>340</b>
<b>§ 34. Ефект Доплера для швидкого джерела випромінювання   за екстремальної умови Вавилова – Черенкова   з урахуванням частоти та імпульсу фотона .....</b>	<b>348</b>
34.1. Кінематичний ефект Доплера .....	348
34.2. Особливості ефекту Доплера в області екстремальних параметрів.....	350
<b>§ 35. Фізичні основи явища каналювання.   Квантований рух і випромінювання   швидких заряджених частинок у кристалах .....</b>	<b>356</b>
35.1. Фізичні принципи явища каналювання .....	356
35.2. Випромінювання каналюваних частинок.....	362
35.3. Механізми каналювання нейтральних частинок .....	363
<b>Список рекомендованої літератури.....</b>	<b>365</b>
<b>Список додаткової літератури.....</b>	<b>366</b>
<b>Додаток. ОСНОВНІ ФІЗИЧНІ КОНСТАНТИ.....</b>	<b>367</b>

## Передмова

Квантова механіка як систематизована наука виникла в середині 20-х рр. ХХ ст. і на початку свого існування швидко перетворилася із суми правил на зразок постулатів Бора чи комбінаційного принципу Рітца для розв'язання конкретних задач на логічно завершену, абстрактно формалізовану й математизовану науку, межі якої зникають з квантовою електродинамікою, теорією відносності, теорією гравітації тощо. На сьогодні квантова механіка є фундаментом прикладної фізики та важливою складовою (безпосередньо або опосередковано) більшості її розділів, а також основою квантової хімії та молекулярної біології.

Саме ідеї та принципи, на яких базується квантова механіка (когерентність і корельованість станів, інтерференційні явища, глобальний зв'язок і взаємовплив процесів тощо), визначають надзвичайно швидкий прогрес у новітніх нанотехнологіях і біотехнологіях. Без активного застосування ідей і методів квантової механіки неможливий прогрес ні в мікрофізиці, ні в астрофізиці. Більше того, саме квантова механіка створює той місток, який логічно об'єднує граничні моделі мікрофізики (напр., теорію суперструн, для якої характерний просторовий масштаб  $10^{-33}$  см) і різні моделі нестационарного Всесвіту (для яких характерний масштаб відповідає  $10^{10}$  світловим рокам). Квантова механіка є основою квантового комп'ютера та квантової криптографії.

Всеосяжне проникнення ідей і методів квантової механіки в галузі, які визначають прогрес цивілізації, вимагає підготовки фахівців високого рівня з прикладної фізики, які здатні успішно працювати та розвивати новітні технології. Цьому мають сприяти відповідні підручники з квантової механіки, які не лише вчити б проводити конкретні розрахунки на основі моделей конкретних явищ, але й розуміти та використовувати базові ідеї "квантового світу".

Більшість існуючих підручників з квантової механіки можна умовно поділити на три групи. До першої з них належать книги, створені

фундаторами квантової механіки. Ці фундаментальні видання чудово відображають ідейні проблеми, що стояли перед класичною фізикою, коли виникла необхідність перегляду багатьох базових понять і представлень. У цих підручниках багато уваги приділено перекиданню містка між класичною та квантовою фізикою з використанням представлень звичайної оптики. Такий підхід у свій час був абсолютно обґрунтованим, оскільки квантову механіку вчили люди, які були виховані на класичних поняттях.

Для сучасних студентів ситуація виглядає дещо інакше. Вони без особливих проблем сприймають і активно використовують такі квантові поняття, як співвідношення невизначеностей або тунельний ефект. І це зовсім не тому, що вони стали розумнішими. Загалом деякі явища, наприклад, тунельний ефект, остаточно зрозуміти неможливо, однак до нього можна звикнути й активно використовувати. Головним є те, що нашим сучасникам, на відміну від людей, вихованих на поняттях класичної фізики, не треба ламати стереотипи, що часом дуже болісно. Сучасним студентам інколи значно простіше зрозуміти квантовий опис явища та процеси, які відбуваються при цьому, ніж спробувати наближено описати його мовою класичної фізики. Особливо це стосується радіофізиків та інших фахівців, які вивчають хвильові процеси, оскільки для них сама "хвильова ідеологія" є звичайною і не вимагає критичного переосмислення явищ.

До другої групи належать підручники, створені з використанням математичного формалізму високого рівня. Вони вимагають глибокої математичної підготовки, що, на жаль, недоступна студентам, які не є фізиками-теоретиками і спеціалізуються в різних галузях прикладної фізики. Такі підручники є корисними для повторного поглибленого вивчення квантової механіки.

До третьої групи можна віднести надто спрощені підручники, у яких недостатньо висвітлені сучасні проблеми квантової фізики. Вони виконують або функцію короткого інформування і служать додатком до класичної фізики, або швидше за все, функцію вступних курсів до суто інженерних дисциплін. Унаслідок фрагментарності та поверхневого викладу такі курси не можуть повноцінно виконувати функцію формування висококваліфікованих фахівців із прикладної фізики.

З іншого боку, наукові статті та монографії, у яких аналізуються прикладні задачі, досить слабо пов'язані з тим, що вивчають студенти. Кожна з них стосується вузького кола спеціальних наукових проблем, про які вони недостатньо проінформовані. Водночас більш уза-

гальнюючі роботи зазвичай мають суто академічний характер і надто відірвані від конкретних прикладних задач. Розв'язання задач на основі стандартних задачників також не може одразу вирішити проблему формування кваліфікованих фахівців, оскільки вони, як правило, розглядають лише модельні абстрактні задачі. Доцільно зауважити, що існуючі підручники не містять матеріал, який дуже важливий фахівцям із прикладної фізики (або містять його в надто складній формі). У них квантова механіка викладена на основі тих самих методів і підходів, які використовувались для аналогічних підручників у перше десятиліття після створення квантової механіки і водночас не приділено достатньої уваги новим явищам і моделям. Це стосується, наприклад, питань корельованих станів квантових систем, прикладних аспектів матриці густини або теорії спонтанного випромінювання квантових систем тощо.

Ще одним недоліком багатьох сучасних підручників є те, що викладений у них матеріал нерідко подано, виходячи не з умов максимальної адаптації до процесу навчання та оптимізації цього процесу, а з персональних і професійних уподобань авторів. Це призводить до того, що студенти не розрізняють, які з розділів є важливими та обов'язковими до вивчення, а які можна при першому читанні пропустити. Доцільною є така структура підручника, яка максимально адаптована до курсу лекцій і містить весь необхідний для вивчення матеріал, а також ілюструються конкретними прикладними задачами.

Мета книжки – дати логічно послідовний і структурований виклад квантової механіки в обсязі, достатньому як для безпосереднього практичного використання в прикладній фізиці, так і для вивчення інших навчальних дисциплін, де використовується апарат і методи квантової механіки, в також показати, яким чином вивчений матеріал можна використати при розв'язанні реальних прикладних проблем і задач. У кінці параграфів наведено контрольні запитання, які допомагають краще зрозуміти та засвоїти відповідний матеріал.

Підручник відповідає програмі курсу "Квантова механіка" для спеціалізації "Прикладна фізика", який автор читає студентам радіофізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка протягом 20 останніх років. Він складається зі структурованих частин (розділів), кожний з яких відповідає певній великій темі. Розділи відповідно поділені на параграфи, кожний з яких стосується, як правило, викладу конкретного питання або окремої задачі. Матеріал структуровано таким чином, щоб полегшити самостійну ро-

боту студентів. При цьому кожен параграф відповідає, як правило, окремій лекції. Літературні посилання в кінці параграфів відповідають базовим підручникам, у яких розглядаються аналогічні питання. До деяких з параграфів наведено посилання на додаткову літературу. Це стосується матеріалу, який недостатньо подано або зовсім не висвітлено у стандартних підручниках. Математичні викладки проводились з тією деталізацією, яка дозволяє студентам повторити їх і простежити за ходом математичних перетворень. Така структура підручника добре узгоджується із загальною тенденцією переходу на кредитно-модульну систему.

В останньому розділі розглянуто деякі приклади практичного використання базових положень квантової механіки для розв'язання низки реальних задач прикладної фізики, що допомагає адаптації студентів до проблем "реальної" фізики після розгляду ними модельних задач.

## Розділ I

### ІДЕЙНІ ПЕРЕДУМОВИ ТА БАЗОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

#### § 1. Історія та передумови виникнення квантової механіки

*Квантова механіка* – це наука, яка визначає метод опису та закони руху і взаємодії мікрочастинок та їх ансамблів. Закони квантової механіки дозволяють безпосередньо пов'язати характеристики процесів, що відбуваються на мікрорівні (в ядрах, атомах, молекулах), з величинами, які характеризують макроскопічні характеристики великих ансамблів (макроскопічні молекули, газ, тверде тіло, плазму). Квантова механіка давно стала основною ідейною та розрахунковою базою для мікроелектроніки, квантової електроніки, ядерної фізики тощо. Більше того, у поєднанні з теорією відносності квантова механіка є основою для розвитку астрофізики та різних розділів науки про еволюцію Всесвіту.

Історія виникнення квантової механіки є одним із найбільш характерних прикладів хронологічно документованого процесу народження й розвитку науки, що має фіксовану дату початку виникнення та інтервал часу, коли були побудовані основні засади та отримані базові



результати, які й сьогодні мають пріоритетне значення для безлічі прикладних задач.

В історичному плані квантова механіка як метод опису явищ мікросвіту принципово відмінна від попередніх методів. Заснована вона була в 1900 р. До початку ХХ ст. фізика взагалі (а теоретична зокрема) досягла високого рівня та накопичила дуже великий обсяг експериментальних результатів і теоретичних моделей. Вчені того часу (хоча їх кількість була незрівнянно меншою, ніж сьогодні) були переконані в тому, що вони адекватно розуміють усі процеси, а за допомогою вже відомих теоретичних моделей можуть їх пояснити та обчислити. І справді, механіка, термодинаміка, фізика електричних і магнітних явищ (вона передувала сучасній електродинаміці), хвильова оптика та інші розділи фізики були давно сформовані й логічно обґрунтовані.

Проблеми, які здавалися, на перший погляд, тимчасовими, виникли лише при інтерпретації таких явищ, як двоїста природа світла, що має властивості і хвилі, і потоку частинок, або процеси, які відбуваються в атомах. Зокрема, атоми, якщо їх розглядати як класичні об'єкти, мають бути гранично нестійкими, оскільки рух електрона з прискоренням навколо ядра має приводити до електромагнітного випромінювання та падіння електрона на ядро. Елементарні розрахунки показують, що процес такого падіння має відбутися за частки наносекунди. Така сама доля чекає на всі атоми у Всесвіті. Однак оточуючий нас світ не вкладається в такий песимістичний сценарій, оскільки оцінки, пов'язані з космологічними моделями, показують, що атоми існують мільярди років і ніщо не віщує про їх швидке зникнення.

Інший аспект проблеми пов'язаний зі спектром випромінювання. Якщо вважати атоми класичними об'єктами, то частота випромінювання  $\omega_{\text{випр}}$  має збігатися з класичною частотою обертання електронів навколо ядра  $\omega_{\text{кл}} = v/r$ . Якщо врахувати втрати енергії на випромінювання, то неперервне зменшення радіуса електронної орбіти приводить до такого ж неперервного зростання частоти обертання, тобто і частоти випромінювання. Таким чином, із класичної моделі випливає, що кожний атом живе дуже малий час, протягом якого він має випромінювати всі частоти – від мінімальної, що відповідає початковій орбіті, до максимальної, яка відповідає орбіті мінімального радіуса (при падінні електрона на ядро). Навіть для найлегшого з атомів максимальна частота відповідає жорсткій частині рентгенівського діапазону. Ці результати принципово відрізняються від експериментальних спектрів, які є дискретними й групуються в певні спектральні серії. Максимальна частота випромінювання виявляється набагато меншою,

ніж та, що відповідає максимальній частоті при класичному аналізі. Наприклад, для атома водню ця частота лежить в ультрафіолетовому діапазоні. Зазначені проблеми не вдалось розв'язати методами класичної фізики, що стало наріжним каменем при створенні квантової теорії.

Дуже символічно, що перший крок до створення квантової механіки був зроблений на самому початку ХХ ст. Це відбулося 14 грудня 1900 р., коли професор М. Планк виступив у Берліні на засіданні Німецького фізичного товариства з доповіддю про результати теоретичного аналізу проблеми, відомої як "ультрафіолетова катастрофа". Таке явище пов'язано зі спробою обчислення повної густини енергії

$$U(T) = \int_0^{\omega_{\text{max}}} \{dU(\omega, T)/d\omega\} d\omega \quad (1.1)$$

випромінювання абсолютно чорного тіла при використанні добре відомої формули Релея – Джинса для спектральної густини енергії випромінювання

$$dU(\omega, T)/d\omega = Ak_B\omega^2 T, \quad (1.2)$$

де  $k_B$  – стала Больцмана,  $A = 1/\pi^2 c^2$  – нормівна стала.

Із формули (1.1) з використанням (1.2) випливає, що при розширенні верхньої межі області інтегрування за частотами до  $\omega_{\text{max}} \rightarrow \infty$  повна густина енергії електромагнітного поля стає нескінченною, що є безумовно невірним результатом і свідчить про некоректність використання (1.2). Для виключення цього явно нефізичного результату Планк висунув гіпотезу, згідно з якою будь-яка речовина випромінює та поглинає енергію у вигляді фіксованих мінімальних порцій (квантів), причому величина кожної з них пропорційна частоті випромінювання й має вигляд

$$E = \hbar\omega. \quad (1.3)$$

Введений Планком коефіцієнт пропорційності  $\hbar \approx 1,054 \cdot 10^{-27}$  ерг·с має зміст величини дії. Пізніше він заслужено отримав назву *стала Планка*. Базуючись на цій нічим на той час не обґрунтованій гіпотезі, Планк отримав загальну формулу

$$dU(\omega, T)/d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}. \quad (1.4)$$

Очевидно, що співвідношення (1.4) переходить у формулу (1.2) у випадку гранично низьких частот  $\hbar\omega \ll k_B T$ .

У випадку гранично високих частот  $\hbar\omega \gg k_B T$  формула Планка набуває принципово іншого вигляду

$$dU(\omega, T)/d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp^{-\hbar\omega/k_B T} \quad (1.5)$$

і збігається із законом зсуву Віна, який він запропонував у 1896 р. у результаті обробки даних вимірювань. Із (1.5) видно, що в області частот  $\hbar\omega \gg k_B T$  спектральна густина енергії спадає за експоненціальним законом, що автоматично приводить до скінченності повної енергії (1.1) навіть у тому випадку, коли її обчислювати в межах від  $\omega_{\min} = 0$  до  $\omega_{\max} \rightarrow \infty$ .

Конкретної фізичної моделі, на якій базувалась гіпотеза, Планк не мав. Він вважав, що в речовині існують своєрідні мікрорезервуари, у яких зберігається енергія. При цьому процес випромінювання (або поглинання) відповідав ситуації, коли такий резервуар віддавав (або поглинав) усю енергію. Виходячи із сучасних уявлень, можна зауважити, що такі резервуари і процеси передачі енергії справді існують. Таким резервуаром може бути будь-який рівень енергії в атомі, молекулі або іншій системі, з якого ймовірним є перехід на інший рівень з можливим випромінюванням або поглинанням енергії. Подальшу долю мінімальної порції енергії, яку може випромінювати цей резервуар, Планк не розглядав, вважаючи, що її поширення відповідає звичайним сферичним хвилям і описується стандартними законами електродинаміки. Це, звичайно, не принижує значення гіпотези Планка, де вперше застосовано поняття дискретності щодо процесів випромінювання та поглинання.

Наступний істотний крок у розвитку квантово-дискретної ідеології зробив у 1905 р. А. Ейнштейн, який у той час працював у патентному бюро в Берні (Швейцарія). Він тоді досліджував явище фотоефекту і водночас дуже активно займався питаннями спеціальної теорії відносності. Досліджений у численних експериментах фотоефект мав одну незбагненну для дослідників особливість. Експерименти показували, що в цьому ефекті існує характерна для кожної речовини "червона границя", тобто та мінімальна частота  $\omega_{\min}$  падаючого світла, починаючи з якої відбувається ефект. Важливо зауважити, що фотоефект у області частот  $\omega \geq \omega_{\min}$  був можливий при досить малій інтенсивності опромінення. При  $\omega < \omega_{\min}$  фотоефект неможливий при будь-якій (з використанням техніки того часу) інтенсивності світла.

Ейнштейн висунув гіпотезу про те, що процес дискретизації енергії випромінювання не обмежується самим процесом випромінювання. Він запропонував вважати, що мінімальна порція енергії (квант) поширюється і після процесу випромінювання у вигляді нероздільного цілісного об'єкта. Цей об'єкт пізніше (у 1929 р.) був названий *фотоном*. Рух такого об'єкта можна характеризувати як енергією (1.3), так і імпульсом.

Величина імпульсу була знайдена з виразу для повної енергії під час вільного руху будь-якої частинки

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}. \quad (1.6)$$

При застосуванні цієї формули до світла треба мати на увазі, що кванти світла є релятивістськими частинками, для яких маса спокою дорівнює нулю ( $m = 0$ ). У цьому випадку із виразу (1.6), з урахуванням формули Планка (1.3), маємо вираз для імпульсу цієї нероздільної порції (фотона)

$$p = \hbar\omega/c = \hbar k, \quad k = \omega/c = 2\pi/\lambda. \quad (1.7)$$

Неподільність і цілісність фотона приводить до того, що він переносить незмінну порцію енергії  $E = \hbar\omega$ . Виходячи з такого висновку, легко зрозуміти зміст фотоефекту. При поглинанні фотона з енергією  $E = \hbar\omega$  атомом відбувається виривання електрона. На це потрібна певна енергія – робота виходу  $A \equiv e\phi_{\text{юн}}$ , яка визначається зарядом електрона та потенціалом іонізації  $\phi_{\text{юн}}$ . Написавши закон збереження для цього процесу і враховуючи, що фотоелектрони після завершення фотоефекту можуть мати швидкість  $v$ , приходимо до рівняння Ейнштейна для фотоефекту:

$$\hbar\omega = A + \frac{mv^2}{2}. \quad (1.8)$$

Очевидно, що "червона границя" фотоефекту відповідає величині

$$\omega_{\min} = A/\hbar \quad (1.9)$$

і є характерним параметром для кожного атома або іншого об'єкта, на якому можливий фотоефект.

Зазначимо, що хоча введення поняття фотона дозволило розв'язати проблему фотоефекту, але до самої ідеї про можливість існування окремих стабільних порцій світла, яку ввів Ейнштейн, ставлення було дуже скептичним аж до середини 20-х рр. ХХ ст. Це було пов'язано з тим, що хвильова теорія Френеля на той час досягла блискучих результатів і була загальноприйнятою. Вважалося, що введення поняття "фотон" є фактичним відступом до старих ідей Ньютонів. Склалися ці-

кава ситуація – модель фотоефекту була сприйнята з ентузіазмом і за її створення Ейнштейн отримав Нобелівську премію, а теорія фотона, яка невіддільна від явища фотоефекту, була фактично відхилена. Ейнштейну "пробачали" модель фотона, зважаючи на його надзвичайно високий авторитет у створенні теорії відносності. Ситуація змінилась лише в 1923 р. після експериментів А. Комптона з дослідження процесу зміни частоти фотонів при їх розсіюванні на вільних електронах.

Уперше підтвердженням того, що енергія може поглинатися атомами у вигляді окремих порцій був експеримент, проведений Дж. Франком і Г. Герцем у 1913 р. Їх експериментальна установка являла собою триелектродну лампу (тріод), у якій катод у вигляді тонкого розігрітого дроту був джерелом електронів. Ці електрони під дією прискорювальної різниці потенціалів  $U_a$ , прикладеної між катодом і анодом, рухалися в об'ємі лампи, створюючи струм  $I_a$ . Основне прискорення відбувалося біля поверхні катода. Типову вольт-амперну залежність  $I_a(U_a)$  для вакуумного діода (за відсутності впливу сітки) представлено на рис. 1.1, а. Якщо між катодом і сіткою прикласти невелику гальмівну різницю потенціалів  $U_g$ , то якісний вигляд залежності  $I_a(U_a)$  залишиться незмінним.

Принципово інший випадок, коли об'єм лампи заповнений газом, що перебуває під невеликим тиском. У даному експерименті об'єм заповнений парами ртуті. Результат цього експериментального дослідження вольт-амперної залежності  $I_a(U_a)$  представлено на рис. 1.1, б.

При різниці потенціалів 4,9 В та 9,8 В і наявності парів ртуті в залежності  $I_a(U_a)$  спостерігалися два вузьких і глибоких провали струму. Походження цих провалів пов'язано з тим, що прискорені електрони взаємодіяли з атомами ртуті і, внаслідок цього, втрачали енергію. Електрони, які зупинялися, не могли подолати гальмівну дію сітки і потрапити на анод.

Легко переконатись, що електрони з малою масою  $m$  не могли втратити свою енергію в результаті пружного розсіювання на важких атомах ртуті з масою  $M$ , які до розсіювання можна вважати нерухомими. Процес пружного розсіювання описується законами збереження енергії та імпульсу:

$$\frac{mv_1^2}{2} = \frac{mv_2^2}{2} + \frac{MV^2}{2}, \quad m\vec{v}_1 = m\vec{v}_2 + M\vec{V}, \quad (1.10)$$

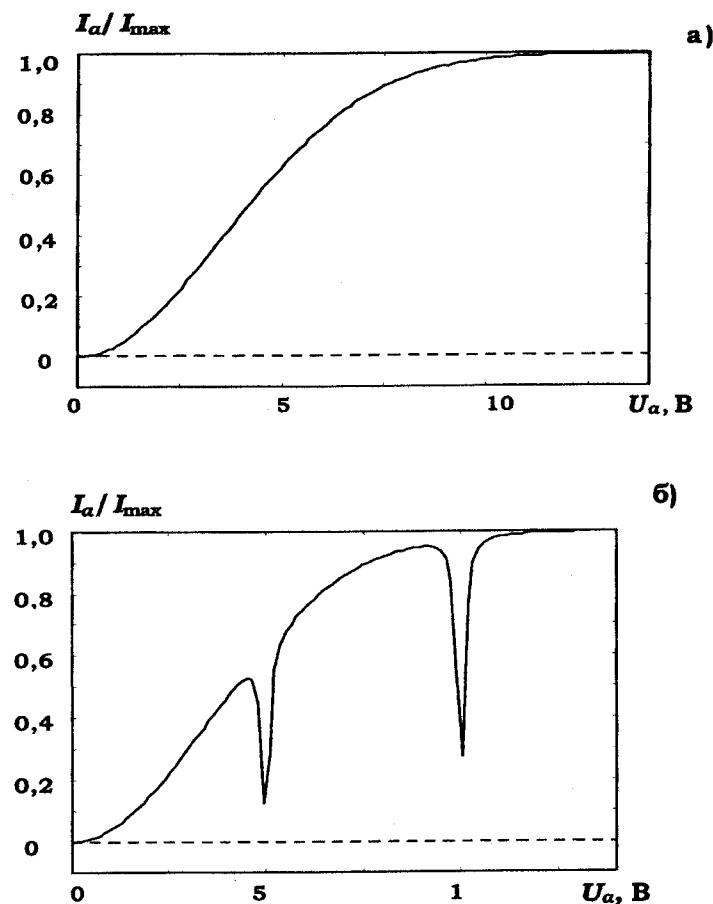


Рис. 1.1. Вольт-амперна залежність  $I_a(U_a)$  у вакуумному тріоді (а) і тріоді, об'єм якого заповнений парами ртуті (б)

Максимальна величина енергії передається при одномірному розсіюванні. Для такого випадку є очевидним, що відношення максимальної кінетичної енергії атома ртуті до кінетичної енергії електрона після одноразового пружного розсіювання дорівнює

$$\alpha = \left( \frac{MV^2}{2} \right) / \left( \frac{mv_1^2}{2} \right) = 4 \frac{m}{M} \ll 1, \quad (1.11)$$

а у випадку розсіювання електронів на атомах ртуті –  $\alpha \approx 10^{-5}$ .

За малої щільності парів ртуті та невеликому розмірі лампи найбільш ймовірними є одно- та двократне розсіювання. Цей результат свідчить, що електрон не може віддати суттєвої частки енергії при пружному розсіюванні на важких атомах. Очевидно, що єдина можливість майже повного гальмування електрона пов'язана з непружним розсіюванням, яке веде до збудження внутрішніх степенів свободи. З експерименту безпосередньо випливає, що такий процес можливий тільки при строго фіксованій енергії електрона (у даному випадку при енергії 4,9 еВ). Електрони з такою енергією швидко гальмуються, а після зупинки не можуть подолати бар'єр, створений полем сітки. Поява другого мінімуму пов'язана з можливістю повторного прискорення електрона після початкового гальмування до тієї самої порогової енергії 4,9 еВ. Цей експеримент підтвердив дискретність процесу поглинання енергії атомами.

Наступний крок на підтвердження того, що дискретність є базовою характеристикою на рівні явищ мікросвіту, зробив Н. Бор у 1913 р. У цей час він працював у лабораторії Е. Резерфорда – фундатора планетарної моделі атома. Бор провів детальний аналіз відомих даних про спектри атомних систем і висунув ряд положень, відомих в історії фізики, як *постулати Бора*, що описують напівкласичну модель атома за Бором:

1) електрони в атомах рухаються по стаціонарних орбітах (перебувають у стаціонарних станах), на яких вони не випромінюють і не поглинають енергію;

2) випромінювання або поглинання світла відбувається тільки при переході з однієї стаціонарної орбіти на іншу. Частота таких переходів визначається із закону збереження енергії й дорівнює

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}. \quad (1.12)$$

Ці два постулати доповнюються умовою квантування, яка в остаточному формулюванні Бора є такою: стаціонарними вважаються такі орбіти (стани), для яких момент кількості руху електрона  $L$  відповідає умові

$$L \equiv mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.13)$$

У цій умові  $m$  і  $v$  – відповідно маса електрона та його швидкість на дозволеній орбіті з радіусом  $r$ ,  $n$  – номер орбіти.

Умова стаціонарності колової орбіти визначається сумісним виконанням умови рівності абсолютних значень кулонівської сили притягування електрона до ядра

$$F_e = -\frac{Ze^2}{r^2} \quad (1.14)$$

і відцентрової сили, яка відповідає руху електрона на коловій орбіті

$$F_m = \frac{mv^2}{r}, \quad (1.15)$$

а також умови (1.13). Із цих рівностей визначається радіус стаціонарних орбіт

$$r_n = \frac{n^2 a}{Z}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \text{ \AA}, \quad (1.16)$$

а також вираз для швидкості та енергії частинки на конкретній стаціонарній орбіті

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar}, \quad E_n = -\frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^2 n^2} \quad (1.17)$$

і вираз для частоти переходів між стаціонарними орбітами

$$\omega_{nk} = R \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad R = \frac{Z^2 e^4 m}{2\hbar^3}. \quad (1.18)$$

Величину  $R$  називають *сталю Рідберга*, а співвідношення (1.18) – *формулою Бальмера*.

Радіус борівських орбіт дуже швидко зростає зі збільшенням номера орбіти  $n$ . Зокрема, при  $n \geq 100$  радіус орбіти перевищує одиниці мікронів. Фактично це – класичний об'єкт. Атоми з такими великими значеннями номера орбіти називають *ридбергівськими атомами*. Енергія іонізації для таких атомів надзвичайно мала й у разі  $Z = 1$  не перевищує одиниць градусів Кельвіна. Такі атоми є дуже цікавими об'єктами. У наш час на їх основі проводяться прецизійні вимірювання світових констант. Такі атоми можна утримувати у стійкому стані тільки при дуже низькій температурі та дуже низькому тиску газу.

Частота переходу (1.18) між сусідніми рівнями  $n \leftrightarrow n \pm 1$  при великому значенні  $n \gg 1$  асимптотично переходить у частоту обертання електрона на класичній орбіті із заданим значенням  $r_n$  (1.16), що є відображенням так званого *принципу відповідності*. Принцип відповідності стверджує, що квантово-механічні моделі та відповідні розрахунки мають будуватися таким чином, щоб асимптотично переходити в результати класичної фізики за певних граничних умов (як правило, при переході до великих значень енергії, великих квантових чисел, великих розмірів системи, тобто при переході до макроскопічних систем). Цей принцип був логічною вимогою й базувався на розумінні того, що природа єдина і не має бути ніякої різкої межі між



галузку застосування класичної фізики та галузку, де діють нові квантові теорії. Поява такого принципу була викликана самим методом побудови теоретичних моделей у "старій квантовій теорії", для якої було характерне об'єднання класичних представлень (поняття орбіти, положення, імпульсу) з додатковими некласичними постулатами типу постулатів Бора. Із розвитком квантової теорії як аксіоматичної науки, що відмовляється від деяких класичних понять у їх традиційному розумінні і спирається лише на формалізовані постулати, пряма необхідність у такому принципі зникла, він почав виконуватися автоматично. Питання про ієрархію співвідношень класичного та квантового аналізів буде детально розглянемо далі.

Формула (1.18) ідентична співвідношенню, встановленому як емпіричне правило ще в 1907 р. на основі аналізу великої кількості спектральних ліній, які характеризують частоти випромінювання та поглинання в атомах, і має назву *комбінаційний принцип Рітца*. Ця формула описує положення спектральних ліній атомів водню та воднеподібних важких іонів із зарядом ядра  $Z > 1$ , кратність іонізації яких дорівнює  $Z - 1$ . При різних комбінаціях квантових чисел  $n$  і  $k$  формула (1.18) характеризує частоти переходів близько 10 спектральних серій, у кожній з яких реєструється близько 20–30 спектральних ліній. Положення цих 200–300 ліній узгоджується з їх експериментальними значеннями для частот переходів з відносною точністю, не меншою від  $10^{-4}$ . Такий збіг результатів розрахунку з даними експериментів не міг бути випадковим, він однозначно свідчив, що модель Бора, не зважаючи на її еkleктичність (існування одночасно класичних і квантових понять, постулювання можливості існування класичних траєкторій, на яких прискорення заряджених частинок не веде до випромінювання тощо), справді відображала фізичну реальність. Пізніше ця модель була поширена та узагальнена на випадок замкнених траєкторій довільного типу, відмінних від колової. У найбільш загальному вигляді вона була сформульована у вигляді правила квантування Бора – Зоммерфельда в 1916 р.

$$\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar n_i, \quad n_i = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.19)$$

де  $p_i, q_i$  – канонічно спряжені координата та імпульс частинки. Було багато інших спроб удосконалити цю модель, поширити її на інші системи, але вона швидко дійшла до границі меж застосування. Зокрема, усі спроби розрахувати на її основі наступний за складністю після водню атом гелію виявились неефективними.

Значний внесок у подальший розвиток передумов квантової механіки зробив Л. де Бройль. Він був першим із вчених, який повірив у реальність фотонів і прийняв гіпотезу Ейнштейна про можливість і реальність співіснування корпускул і хвиль. У своїй дисертації, представленій до захисту в 1924 р., де Бройль, використовуючи ідеї квантування Планка і Ейнштейна, а також загальні ідеї теорії відносності, пішов далі та запропонував вважати, що не тільки світлу притаманні корпускулярні властивості, але й будь-якому матеріальному тілу притаманні хвильові властивості.

За великим рахунком у дуже стислому вигляді можна сказати, що де Бройль постулював можливість використання формул  $E = \hbar\omega$  (1.3) і  $p = \hbar\omega/c = \hbar k$  (1.7) не тільки в первісному вигляді (тобто, читаючи їх справа наліво і ставлячи у відповідність хвильовому процесу з певною частотою  $\omega$  і певною довжиною хвилі  $\lambda$  конкретну енергію та імпульс), але й у зворотному порядку:

$$\omega = E/\hbar, \quad \lambda = 2\pi/p. \quad (1.20)$$

При такому трактуванні будь-якому матеріальному об'єкту, який характеризується фіксованою енергією і фіксованим імпульсом, можна поставити у відповідність хвильовий процес (хвилю де Бройля)

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\left\{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{r}\right)\right\} \quad (1.21)$$

з певною частотою  $\omega$  і певною довжиною хвилі  $\lambda$ , а також певним хвильовим вектором  $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$ .

Л. де Бройль за допомогою своєї ідеї та правила квантування Бора – Зоммерфельда зміг легко пояснити особливості квантування в моделі Бора. Кожна з орбіт електрона є своєрідним резонатором. Умова стійкості такої системи пов'язана з просторовим резонансом для хвиль де Бройля – траєкторія буде стійкою, якщо вздовж неї вкладається ціле число хвиль де Бройля для електрона, що рухається навколо ядра. За такого трактування кожна електронна орбіта є своєрідним аналогом струни, у якій збуджуються коливання. Слід зауважити, що такий підхід дуже близький до сучасної моделі елементарних частинок у вигляді замкнених суперструн надмалого розміру  $r \approx 10^{-33}$  см, у яких збуджуються різні коливальні моди. Ці ідеї спочатку не були сприйняті науковою спільнотою, вважались певною мірою абсурдними, а саму дисертацію де Бройль захистив з перевагою всього в один голос за рахунок підтримки математиків, які поряд з фізиками брали участь у захисті дисертації (у наш час така дисертація бу-

ла б гарантовано відхилено ВАКом!). Водночас Ейнштейн зрозумів і оцінив ці ідеї, хоча спочатку вважав їх занадто радикальними (він навіть писав у листі до Борна: "їх автор несповна розуму, хоча дисертація дуже солідна").

Геніальні ідеї Л. де Бройля були підтверджені лише в 1927 р. в експерименті К. Девісона та А. Джермера, які відкрили явище дифракції прискорених електронів на кристалічних площинах при їх проходженні крізь тонку металеву фольгу. Трохи пізніше, у 1929 р., О. Штерн спостерігав явище дифракції атомів гелію на кристалах кам'яної солі, а разом з І. Естерманом – явище дифракції атомів гелію та молекул водню на кристалі LiF.

### Контрольні запитання

1. Як узгоджуються хвилі де Бройля з постулатами Бора?
2. Фазова швидкість електромагнітних хвиль залежить від діелектричної проникності середовища. Яка величина є аналогом діелектричної проникності для хвиль де Бройля?
3. Чи можливе стійке існування атома Бора з розміром електронної орбіти в 1 см, коли він міститься в повітрі за кімнатної температури?

**Література:** [1], § 1–8; [2], С. 9–20.

## § 2. Статистичний характер явищ мікросвіту

### 2.1. Статистична інтерпретація хвильової функції

Відкриття хвильової природи речовини, яке базувалось на гіпотезі Л. де Бройля й було однозначно доведено в експериментах з дифракції мікрочастинок, поставило питання про конкретну фізичну інтерпретацію хвильових властивостей мікрочастинок, а саме, хвильової функції  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Доцільно зазначити, що представлена у формулі (1.21)

функція  $\Psi(\vec{r}, t)$  у вигляді плоскої хвилі є лише одним із багатьох прикладів можливого виду функцій  $\Psi(\vec{r}, t)$ .

Повсякденний досвід людини не дозволяє їй одразу уявити, яким чином одному й тому самому матеріальному об'єкту можна приписати одночасно і корпускулярні властивості, і властивості хвилі. Обернену інтерпретацію зробити значно легше – неважко уявити, що пакет хвиль у вигляді, наприклад, короткого електромагнітного сигналу має деякі корпускулярні властивості (незмінну форму, локалізацію в просторі тощо), і в цьому сенсі така двоїстість не викликає особливого спротиву.

Оскільки першим інтуїтивним кроком будь-якого вченого щодо нового явища є розуміння його на рівні аналогій з уже відомими процесами, то початкова спроба з'ясування двоїстості була майже передбачуваною. Хід думок був таким: будь-який хвильовий процес можна представити як його часовою залежністю  $F(t)$ , так і спектральною густиною  $F(\omega)$ . В узагальненому вигляді перша характеристика описується середньою тривалістю  $\langle \Delta t \rangle$ , а друга – усередненою шириною спектра  $\langle \Delta \omega \rangle$ .

Із теорії фур'є-перетворень

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad (2.1)$$

$$F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt \quad (2.2)$$

випливає, що ці величини пов'язані простим співвідношенням

$$\langle \Delta t \rangle \approx \frac{2\pi}{\langle \Delta \omega \rangle}. \quad (2.3)$$

Аналогічні перетворення дозволяють пов'язати просторову структуру хвильового пакета  $F(\vec{r})$  у координатному просторі та його спектральну густину в  $k$ -просторі  $F(\vec{k})$ :

$$F(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int F(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}} d^3k, \quad (2.1, a)$$

$$F(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int F(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r, \quad (2.2, a)$$

$$\langle \Delta r_i \rangle \approx \frac{2\pi}{\langle \Delta k_i \rangle}. \quad (2.3, a)$$

З аналізу співвідношень (2.3) і (2.3, а) випливає, що будь-який короткий (у просторі або часі) хвильовий пакет можна синтезувати за допомогою суперпозиції дуже широкого набору спектральних гармонік, кожна з яких представляє монохроматичну плоску хвилю. При цьому просторово-часовий розподіл енергії пакета визначається величиною  $|F(\vec{r}, t)|^2$ . Оскільки дуже короткий хвильовий пакет подібний до частинки, то здається очевидним, що і частинку можна представити як суперпозицію плоских хвиль де Бройля, тобто зробити ототожнення  $\Psi(\vec{r}, t) \equiv F(\vec{r}, t)$ , а густину речовини описати величиною  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ . На перший погляд, така аналогія є логічно обґрунтованою. До речі, таку модель спочатку активно підтримував Е. Шредингер, який був одним із творців квантової механіки. Простий аналіз показав, що ця аналогія некоректна, а частинки не можна представити як результат реальної інтерференції хвиль де Бройля. Насамперед це пов'язано з проблемою стійкості хвильових пакетів, утворених із таких хвиль.

Добре відомо, що під час руху електромагнітних хвиль крізь середовище з показником заломлення  $n(\omega)$  відбувається явище дисперсії. Причиною цього явища є фазові швидкості різних спектральних компонент  $F(\omega)$ , що залежать від частот і хвильових чисел цих констант. Рівняння дисперсії для електромагнітних хвиль у ізотропному середовищі має вигляд  $\omega = kc/n(\omega)$ . Із цього рівняння можна знайти вираз для фазової швидкості електромагнітних хвиль

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{n(\omega)}. \quad (2.4)$$

У вакуумі  $n(\omega) = 1$ , а дисперсія відсутня. Завдяки цьому у вакуумі будь-який хвильовий пакет поширюється без дисперсії та зберігає свою форму і розмір.

Інший випадок маємо для хвиль де Бройля. Його можна розглянути, виходячи із виразу для повної енергії вільного руху будь-якої частинки

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m}. \quad (2.5)$$

Якщо використати формули Планка (1.3) та Ейнштейна (1.7), то з рівняння (2.5) можна отримати вираз для фазової швидкості хвиль де Бройля:

$$v_{\text{фаз}} = \frac{\omega}{k} = \frac{mc^2}{\hbar k} + \frac{\hbar k}{2m}. \quad (2.6)$$

Із (2.6) випливає, що різні спектральні компоненти мають різну швидкість. Це призводить до порушення з плином часу фазових співвідношень між ними, що веде до незворотного просторового та часового розширення (диспергування) пакета. Наведене свідчить про абсолютну нестійкість пакета, утвореного із хвиль де Бройля. Простий аналіз показує, що швидкість диспергування пакета залежить, зокрема, від розміру та маси пакета. Наприклад, для частинки з масою, що дорівнює масі електрона  $m \approx 10^{-27}$  г, і класичним розміром електрона  $L = 2r_e \approx 4 \cdot 10^{-13}$  см, час подвоєння розміру  $L \rightarrow 2L$  за рахунок явища дисперсії хвиль де Бройля не перевищує дуже малу величину  $\tau_e \approx mL^2/\hbar \approx 10^{-25}$  с! Очевидною є абсурдність такого результату, ураховуючи такий факт, що електрон є стабільною частинкою.

Вірну фізичну інтерпретацію хвильових властивостей мікрочастинок (і, зокрема, розуміння змісту хвильової функції  $\Psi(\vec{r}, t)$ ) зробив М. Борн у 1926 р. Його висновок базувався на очевидному аналізі дифракційного експерименту для будь-якого хвильового процесу. Зробимо такий аналіз на основі класичного експерименту з дифракції плоскої хвилі на непрозорому екрані з двома отворами (рис. 2.1).

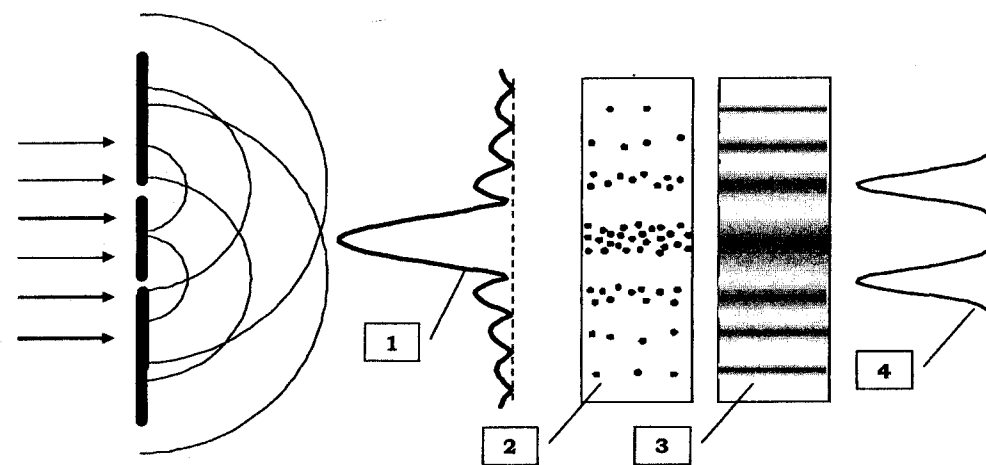


Рис. 2.1. Дифракція плоскої хвилі й потоку мікрочастинок на екрані з двома отворами та з детектором, що розташований за екраном і орієнтований паралельно до його площини

Спочатку розглянемо експеримент зі світлом. У випадку падіння на цю систему інтенсивної оптичної хвилі на екрані, розташованому за системою отворів, буде спостерігатись інтерференційна картина, яка є результатом когерентної інтерференції двох сферичних хвиль від двох отворів. Розподіл інтенсивності результуючої хвилі в різних випадках представлено в правій частині рис. 2.1: 1 – теоретичний розподіл інтерференційного поля на поверхні детектора; 2 – експериментальний розподіл місць взаємодії квантів з поверхнею детектора (напр., фотоплівкою) за малої кількості зареєстрованих фотонів; 3 – експериментальний розподіл місць взаємодії квантів з поверхнею фотоплівки за великої кількості зареєстрованих фотонів; 4 – теоретичний розподіл інтенсивності поля на поверхні детектора при незалежному проходженні фотонів крізь отвори в екрані. Такий результат спостерігатиметься для будь-якого методу реєстрації (напр., фотоплівки або фотодетектора). Зазвичай такий процес трактують таким чином: відбувається розщеплення плоскої хвилі на дві частини, які потім інтерферують. Цей розподіл збігається з теоретичним розподілом інтерференційного поля.

Що зміниться, якщо ми будемо зменшувати інтенсивність світла? Очевидно, що яскравість картини спочатку буде спадати при незмінному розташуванні максимумів і мінімумів інтерференційної картини. При гранично малій інтенсивності падаючої хвилі ситуація принципово зміниться. Якщо на систему отворів буде падати така малоінтенсивна хвиля, що в кожний конкретний момент на екран буде падати, наприклад, по одному фотону, то ніякої розподіленої по поверхні картини інтерференції не буде. Це очевидний висновок, тому що для утворення такої картини необхідно, щоб фотони потрапляли на різні частини екрана. Однак у нас у кожний конкретний момент часу існує тільки один фотон з енергією  $E_0 = \hbar\omega_0$  (який відповідає, напр., частоті синього кольору). Якщо припустити, що фотони при інтерференції потрапляють на різні частини екрана, то енергія початкового фотона має розділитися і  $E_0 = \sum_i \hbar\omega_i$ ,  $\omega_0 = \sum_i \omega_i$ , а такий процес поді-

лу відповідає тому, що замість одного фотона синього кольору матимемо багато фотонів червоного або інфрачервоного кольору. Це явно абсурдний результат.

А що буде? На екрані будуть по черзі фіксуватися окремі події (окремі акти реєстрації фотонів, кожний з яких матиме ту саму початкову частоту  $\omega_0$ ). Місце потрапляння кожного окремого фотона буде випадко-

вим процесом. Взаємодія кожного із фотонів з детектором фіксується як локальна довершена подія і не містить ознак хвильового процесу.

Характерна інтерференційна картина поступово виникає лише при відповідному наборі статистики реєстрації фотонів. Приклади експериментального розподілу місць взаємодії квантів з поверхнею фотоплівки за малої та великої кількості зареєстрованих фотонів представлено в правій частині того самого рис. 2.1. Такий результат не залежить окремо від тривалості чи інтенсивності опромінення, а лише від їх добутку, тобто від кількості зареєстрованих фотонів. Легко впевнитись, що найімовірнішим буде їх потрапляння на ті частини екрана, які відповідають максимуму тієї інтерференційної картини, що безпосередньо спостерігалась у реальному масштабі часу при падінні інтенсивного пучка. Такий характер взаємодії є прямим доказом існування як хвильових, так і корпускулярних характеристик світла. Із практичної точки зору хвильові характеристики легше спостерігати за великої інтенсивності, а корпускулярні – за малої.

Інтерференційна картина розподілу зареєстрованих подій буде лише тоді, коли не досліджується, через який саме отвір пройшов фотон. Якщо зробити спробу такого дослідження за допомогою будь-якого детектуючого пристрою, розташованого біля одного з отворів, то інтерференційна картина зникає й розподіл інтенсивностей на поверхні детектора відповідатиме накладанню розподілів інтенсивностей світла, яке пройшло крізь кожний з отворів (графік 4 на рис. 2.1). Пояснення впливу процесу такого вимірювання на формування інтерференційної картини з'ясуємо далі.

Подібний випадок маємо при інтерференції мікрочастинок. Проходження кожної окремої мікрочастинки через дифракційну систему дає результат, який відповідає корпускулярній взаємодії, а хвильові властивості мікрочастинок, які в теоретичних моделях відповідають просторовому розподілу інтенсивності хвильової функції  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ , виявляються лише при наборі статистики! Це показує, що кожний акт індивідуальної взаємодії частинки характеризується корпускулярними величинами, а хвильові властивості виявляються лише в міру вияву статистичних закономірностей. Такі міркування привели Борна до статистичної інтерпретації хвильової функції, яку він вперше сформулював у 1926 р. у вигляді твердження: *"рух частинки відповідає законам імовірності, а сама імовірність поширюється відповідно до законів причинності"*. Згідно із цією інтерпретацією інтенсивність



хвильової функції  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  визначає розподіл імовірності просторової локалізації частинки – імовірність розміщення мікрочастинки в елементарному об'ємі  $dV$  в околі точки з радіус-вектором  $\vec{r}$  у момент часу  $t$  визначається виразом  $dW(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ . Звідси знаходимо, що величина  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  має зміст просторової густини ймовірності локалізації частинки в даний момент часу біля даної точки

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \frac{dW(\vec{r}, t)}{dV}. \quad (2.7)$$

Виходячи з такої інтерпретації очевидно, що задана в такий спосіб хвильова функція має зміст амплітуди ймовірності й повинна задовольняти певні умови. Вона має бути скінченною, неперервною, задовольняти граничну умову

$$\Psi(|\vec{r}| \rightarrow \infty, t) = 0, \quad (2.8)$$

а її інтенсивність  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  має бути нормованою:

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1. \quad (2.9)$$

Інші вимоги до хвильової функції будуть з'ясовані далі при розгляді конкретних фізичних систем.

Для пояснення явища дифракції необхідно припустити, що в тому випадку, коли частинка може перебувати в різних станах з відповідними хвильовими функціями  $\Psi_1, \Psi_2, \dots$ , загальна хвильова функція системи має бути суперпозицією (лінійною комбінацією) цих функцій:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}, t). \quad (2.10)$$

У цьому виразі коефіцієнти  $c_n$  є нормуючими величинами, зміст яких полягає в тому, що величина  $|c_n|^2$  визначає вагову функцію кожного зі станів  $\Psi_n(\vec{r}, t)$  у складі загальної хвильової функції  $\Psi(\vec{r}, t)$ .

Співвідношення (2.10) є наслідком одного з найбільш фундаментальних принципів квантової механіки – принципу суперпозиції, який розглянемо пізніше. Виходячи із цих припущень, легко зрозуміти явище формування інтерференційної структури, яка відповідає розподілу густини ймовірності потрапляння частинок у різні частини детектора.

У випадку двох отворів хвильова функція частинки за екраном з отворами має вигляд

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2. \quad (2.11)$$

Кожна із цих функцій відповідає стану частинки, що пройшла крізь відповідний отвір. Якщо врахувати, що кожна із хвильових функцій є комплексною і містить фазовий множник  $\Psi_n = |\Psi_n| e^{i\varphi_n}$ , то просторовий розподіл підсумкової густини ймовірності в будь-якій точці за екраном з отворами має вигляд

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{2} |\Psi_1|^2 + \frac{1}{2} |\Psi_2|^2 + |\Psi_1| |\Psi_2| \cos(\varphi_1 - \varphi_2). \quad (2.12)$$

Якщо врахувати, що кожна із фаз  $\varphi_n(\vec{r}, t)$  залежить від часу та поточної координати, то функція (2.12) адекватно описує інтерференційну картину у площині детектора. Ця інтерференційна картина буде стійкою (не флукуватиме зі зміною часу) лише при фіксованій різниці фаз  $\varphi_1$  і  $\varphi_2$ . Це відбуватиметься, наприклад, якщо в просторі за екраном (після розщеплення початкової хвилі) не існуватиме дефазуючий фактор (напр., просторова або часова флуктуація властивостей середовища).

Якщо спробувати якимось чином зареєструвати факт проходження фотона крізь один із отворів, то це призведе до появи випадкової флуктуації фази  $\varphi_n \rightarrow \varphi_n + \delta\varphi_n$  відповідної хвилі за рахунок взаємодії частинки з тим додатковим реєструючим приладом, який фіксує проходження частинки саме крізь конкретний отвір у екрані. У цьому випадку в аргументі косинуса в (2.12) виникне ця випадкова фаза  $\delta\varphi_n$ , що приведе до  $|\Psi|^2 \equiv |\Psi(\delta\varphi)|^2$ .

Кінцевий вираз для усередненого за часом (або за ансамблем частинок) розподілу густини ймовірності можна знайти із формули (2.12) після відповідного усереднення за величиною та знаком цієї фази. Якщо врахувати, що  $\langle \cos(\varphi_1 - \varphi_2 \pm \delta\varphi) \rangle_{\delta\varphi} = 0$ , то розподіл усередненої густини ймовірності (2.12) за наявності такого механізму неконтрольованої зміни фази набуде принципово іншого вигляду:

$$\langle |\Psi|^2 \rangle = \frac{1}{2} |\Psi_1|^2 + \frac{1}{2} |\Psi_2|^2. \quad (2.13)$$

У цьому випадку результуюча густина ймовірності буде сумою густин ймовірності, які характеризують незалежне проходження частинки через кожний із каналів.

## 2.2. Середні значення фізичних величин у системах, стан яких описується хвильовою функцією. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Надавши кожній із хвильових функцій  $\Psi(\vec{r}, t)$  зміст амплітуди ймовірності, а інтенсивності  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  зміст густини ймовірності, можна ввести правило усереднення будь-якої фізичної величини в межах системи, яка описується хвильовою функцією  $\Psi(\vec{r}, t)$ , якщо значення цієї величини залежить від положення (координати) мікрочастинки в межах системи

$$\bar{L}(t) = \int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 L(\vec{r}) dV = \int_V \Psi^*(\vec{r}, t) L(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) dV. \quad (2.14)$$

Це співвідношення є одним із головних і найбільш корисних правил квантової механіки, оскільки саме середні величини є тими характеристиками системи, які визначають її незмінні властивості.

Залишимо для подальшого розгляду питання про методи визначення хвильових функцій  $\Psi(\vec{r}, t)$  і розглянемо деякі універсальні співвідношення хвильових функцій  $\Psi(\vec{r}, t)$  і розглянемо деякі універсальні співвідношення, які базуються на ймовірнісній інтерпретації  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Ці співвідношення називають *співвідношеннями невизначеностей*. Вони базуються на об'єднанні правила визначення середніх величин з корпускулярно-хвильовим дуалізмом природи мікрочастинки.

Із класичної фізики добре відомі характерні риси двох станів існування матерії – корпускулярного та хвильового. Кожний із цих станів має певні характеристики. Для першого – це незмінність форми й розміру, можливість необмеженого в часі статичного існування (статичної самолокалізації) тощо; для другого – це принципово нестационарний характер, неможливість стійкої та необмеженої в часі самолокалізації, неможливість існування у статичній формі без носіїв (напр., електростатичного поля без зарядів, гравітаційного поля без мас) тощо. Одночасна наявність як хвильових, так і корпускулярних властивостей у мікрочастинки обмежена тим, що деякі із цих характеристик явно суперечать одна одній. Ця обставина приводить до того, що як реальна частинка, так і реальна хвиля не можуть одночасно мати всі без винятку властивості абстрактної частинки та абстрактної хвилі. Врешті-решт, усе ви-

рішує постановка конкретного експерименту. Якщо він націлений на реалізацію корпускулярних характеристик, то це обмежує вияв хвильових властивостей, і навпаки, реалізація хвильових властивостей певним чином обмежує вияв корпускулярних характеристик.

Зазначена двоїстість давно помічена і широко використовується у фізиці хвильових процесів. Це стосується, наприклад, проблеми синтезу коротких хвильових пакетів. Як було відзначено, середня тривалість пакета  $\langle \Delta t \rangle$  пов'язана із середнім інтервалом частот  $\langle \Delta \omega \rangle$ , які потрібні для його генерації, у формі співвідношення (2.3)  $\langle \Delta \omega \rangle \langle \Delta t \rangle \approx 2\pi$ .

Якщо визначити умови, за яких синтезований сигнал має найбільш виражені хвильові властивості (а це відповідає одній гармоніці з нескінченно вузьким спектром  $\langle \Delta \omega \rangle \rightarrow 0$ ), то це може бути лише при дуже великій тривалості цього сигналу  $\langle \Delta t \rangle \rightarrow \infty$ . Справедливою є й зворотна умова – синтез гранично короткого сигналу, який якісно подібний до частинки, можливий лише за умови використання гранично широкого набору частот. Подібні умови мають існувати й для частинок, яким також притаманні як корпускулярні, так і хвильові властивості.

Розглянемо уявний експеримент, під час якого досліджується однірна координата та однойменна компонента імпульсу мікрочастинки в конкретній фізичній системі, де рух частинки відповідає плоскій хвилі. Для отримання достовірних результатів експеримент проводиться багато разів за ідентичних умов. Почнемо з аналізу результатів вимірювання координати частинки в серії експериментів. Результати окремих вимірювань відповідають набору значень координати  $x_1, x_2, x_3, \dots$ . Середнє (за серією вимірювань) значення координати відповідає величині  $\langle \Delta x \rangle$ . Абсолютна похибка  $\Delta x = x - \langle x \rangle$  у кожному з експериментів є випадковою величиною. Оскільки її середнє значення  $\langle \Delta x \rangle$  дорівнює нулю:

$$\langle \Delta x \rangle = \langle (x - \langle x \rangle) \rangle = \langle x \rangle - \langle x \rangle = 0, \quad (2.15)$$

то воно не є задовільною (тобто достатньо інформативною) характеристикою даної серії вимірювань.

Для характеристики похибок у серії експериментів доцільно ввести дисперсію  $\sigma_x$ :

$$\sigma_x^2 = \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - (\langle x \rangle)^2. \quad (2.16)$$

Для зручності виберемо систему координат, у якій  $\langle x \rangle = 0$ . У цій системі

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle.$$

Формула (2.16) дозволяє знайти дисперсію координати як результат обробки серії експериментів. Використовуючи хвильову функцію частинки в стаціонарному випадку  $\Psi(x)$ , можна обчислити ту саму дисперсію з використанням формули (2.14):

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx. \quad (2.17)$$

Продовжимо аналіз серії наших експериментів. У кожному з експериментів вимірювався імпульс тієї самої частинки, а результати окремих вимірювань відповідали множині значень  $p_{x,1}, p_{x,2}, p_{x,3}, \dots$  Таким чином, середній імпульс дорівнює  $\langle p_x \rangle$ . Як і у випадку вимірювань координати, середня похибка вимірювань імпульсу дорівнює нулю ( $\langle \Delta p_x \rangle = 0$ ).

Дисперсія імпульсу  $\sigma_{p_x}$  має вигляд

$$\sigma_{p_x}^2 = \langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2. \quad (2.18)$$

У системі відліку, де  $\langle p_x \rangle = 0$ , вираз для дисперсії імпульсу набуває вигляду

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle. \quad (2.19)$$

Формула (2.19) дозволяє знайти дисперсію імпульсу частинки як результат обробки серії експериментів. Цю саму величину можна обчислити з використанням формули (2.14):

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) p_x^2 \Psi(x) dx. \quad (2.20)$$

Якщо згадати, що у вільному просторі хвильова функція частинки відповідає одномірній хвилі де Бройля (1.21):

$$\Psi(x) = A \exp\left\{-i\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p_x}{\hbar}x\right)\right\}, \quad (2.21)$$

то легко переконатися, що при обчисленні цього інтегралу можна використати формальну заміну

$$p_x \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.22)$$

що значно спрощує процес розрахунку. Доцільність і ефективність подібних заміни детально розглянемо далі. При використанні (2.22) вираз для дисперсії імпульсу (2.20) набуває вигляду

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) dx. \quad (2.23)$$

Розглянемо, як пов'язані між собою дисперсія координати (2.17) та імпульсу (2.23). Можливість такого зв'язку випливає з того факту, що розрахунок обох величин проводиться з використанням однакової хвильової функції  $\Psi(x)$ . Для встановлення такого зв'язку спочатку розглянемо допоміжний математичний вираз

$$J(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \beta x \Psi(x) + \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} \right|^2 dx \geq 0, \quad (2.24)$$

який є невід'ємною величиною. У цьому виразі  $\Psi(x)$  – довільна функція,  $\beta$  – дійсний параметр.

Якщо "розгорнути" підінтегральний вираз у (2.24), то отримаємо нерівність

$$J(\beta) = \beta^2 A + \beta B + C \geq 0, \quad (2.25)$$

у якій

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx, B = \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial |\Psi(x)|^2}{\partial x} dx, \quad (2.26)$$

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*(x)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} dx.$$

Виділивши в нерівності (2.25) повний квадрат стосовно параметра  $\beta$ , маємо

$$A \left( \beta + \frac{B}{2A} \right)^2 + \left( C - \frac{B^2}{4A} \right) \geq 0. \quad (2.27)$$

Оскільки величина  $A$  є інтегралом від невід'ємної величини, то  $A \geq 0$ . Величина  $B$  є дійсною й може набувати як додатних, так і від'ємних значень. Із цих даних випливає, що перший вираз у лівій частині нерівності є невід'ємним, а його мінімальне значення дорівнює нулю. Для виконання умови невід'ємності (2.27) за довільних значень дійсного параметра  $\beta$  необхідно, щоб другий вираз у дужках був невід'ємною величиною, що відповідає умові  $4AC \geq B^2$ . Цю умову, після використання позначень (2.26), можна перетворити на таку:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*(x)}{\partial x} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} dx \geq \frac{1}{4} \left( \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial |\Psi(x)|^2}{\partial x} dx \right)^2. \quad (2.28)$$

У такому вигляді це співвідношення справедливе для будь-яких функцій  $\Psi(x)$ .

У тому випадку, коли функція  $\Psi(x)$  є хвильовою функцією частинки і має зміст амплітуди ймовірності, цей вираз можна істотно спростити. Для цього перетворимо другий і третій інтеграли (вони відповідають величинам  $B$  і  $C$ ), використовуючи інтегрування по частинах і ту особливість хвильової функції  $\Psi(x)$ , що вона дорівнює нулю при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Та сама умова буде дійсною й для похідної від цієї функції. Ці обмеження випливають з умови скінченності та нормованості повної ймовірності локалізації частинки (2.9) у всій області одномірного руху

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1. \quad (2.29)$$

Після інтегрування по частинах і використання граничних умов при  $x \rightarrow \pm\infty$  маємо

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) x^2 \Psi(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} dx \geq \frac{1}{4}. \quad (2.30)$$

Інтеграли, які стоять у нерівності (2.30), пропорційні виразам для дисперсії координати  $\langle (\Delta x)^2 \rangle$  (2.17) та імпульсу  $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$  (2.23). Ураховуючи явний вигляд виразів (2.17) і (2.23), остаточно знаходимо

$$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle \langle (\Delta x)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (2.31)$$

Це відоме співвідношення називають *співвідношенням невизначеностей Гейзенберга для дисперсій координати та імпульсу*. Воно було отримане в 1927 р. Його можна переписати у формі співвідношення для середньоквадратичних невизначеностей цих величин:

$$\delta x \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (2.32)$$

$$\delta x = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle}, \quad \delta p_x = \sqrt{\langle (\Delta p_x)^2 \rangle}.$$

Аналогічні співвідношення справедливі для пар  $y, p_y$  та  $z, p_z$ .

Безпосередній зміст співвідношення (2.32) полягає в тому, що при будь-якій постановці експерименту принципово неможливим є точне

(без похибок) вимірювання координати та імпульсу мікрочастинки. Постановка експерименту, при якій одна з двох дисперсій необмежено зменшується, веде до автоматичного збільшення дисперсії другої величини. Слід зауважити, що це співвідношення стосується не тільки даного експерименту та даного виду хвильової функції у вигляді хвилі де Бройля, але й має універсальний характер і справедливе в будь-якій системі. Додаткове узагальнення цього співвідношення можна зробити у випадку формування так званих *корельованих станів* при розгляді співвідношення невизначеності Шредінгера – Робертсона. Його розглянемо далі.

Фізичний механізм, що веде до появи співвідношення невизначеностей, пов'язаний з процедурою вимірювання, яку слід розглядати як джерело обмежень, що виникають у процесі вимірювань. Нехай система до вимірювання перебувала у стані, який описується хвильовою функцією  $\Psi(x)$ . Сам процес вимірювань у квантовій механіці, на відміну від класичної, завжди є збурювальним, тобто таким, який при вимірюванні однієї величини вносить неконтрольовані зміни (неконтрольоване та недетерміноване статистичне збурення) у досліджувану систему. У результаті такого збурення хвильова функція системи змінюється і стає можливим цілий набір (суперпозиція) її можливих станів. При такому підході вимірювання другої величини відбувається в цій недетерміновано збуреній системі, що й призводить до похибок. Чим точніше вимірюється одна величина, тим сильніше збурюється система, і тим більшою буде похибка при вимірюванні другої величини.

У класичній фізиці вплив процесу вимірювання на вимірювану величину також існує, але тоді він має характер суто технологічних похибок, що залежать від конкретних приладів, їх принципово можна зробити необмежено малими. Для цього треба використовувати більш довершені вимірювальні пристрої.

У мікросвіті, для якого характерний дуже малий масштаб вимірюваних явищ, вплив вимірювального приладу не можна зробити необмежено малим. У кожному випадку існує та межа збурення досліджуваної системи, яка не залежить від типу вимірювального приладу й пов'язана саме з процесом вимірювання. Додаткове уточнення такого процесу взаємного впливу вимірювання двох величин буде дано далі, у розділі, присвяченому загальному співвідношенню невизначеностей, і властиве не тільки координатам та імпульсу, але й безлічі інших величин.

Перелічені міркування не викликають особливих заперечень. Заперечення та альтернативні інтерпретації виникають при розгляді питання про те, чи стосується процес формування взаємних невизначе-



ностей тільки самого процесу вимірювання, чи ці невизначеності мають більш глибокий внутрішній характер. Можливі різні інтерпретації цього співвідношення. Згідно з однією з них (її активно підтримував Ейнштейн), точні значення двох величин, які входять у співвідношення невизначеностей, насправді існують і є об'єктивними характеристиками об'єкта досліджень, але ми через неконтрольований вплив процесу вимірювання не можемо їх визначити. Цей підхід звівся до гіпотези про можливість існування так званих прихованих параметрів, тобто таких величин, які ніби характеризують об'єкт досліджень, але їх не можна виміряти та визначити.

Згідно з іншим поглядом, який активно підтримував Бор, співвідношення невизначеностей накладає принципове обмеження на одночасне існування точних значень тих величин, які до нього входять, а це веде до принципової відсутності прихованих параметрів. Інакше кажучи, немає сенсу досліджувати точні значення цих величин, оскільки сама постановка питання є принципово хибною (хибною за означенням). Прикладом такого хибного підходу є спроба стверджувати (і вимірювати) точне значення довжини хвилі при дослідженні хвильового процесу в малому околі довільної точки. Очевидно, що в цьому випадку можна казати тільки про просторово обмежену частину хвильового процесу, який приводить до його широкого спектра з великим набором різних довжин хвиль.

На сьогодні існує загальноприйнята думка про відсутність прихованих параметрів, які принципово не можна визначити. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга має велике пізнавальне значення й водночас є дуже корисним при якісних оцінках багатьох процесів. Наведемо деякі приклади його використання, а саме:

а) із співвідношення невизначеностей легко знайти відповідь на питання, чи можуть стабільно існувати нерелятивістські електрони в межах атомного ядра? Таке питання виникало при створенні моделі ядра. Один із варіантів структури ядра базувався на припущенні, що ядро складається з протонів та електронів. Підставою для цієї моделі було те, що багато нестабільних ядер при розпаді випромінюють електрони. Прикладом такого процесу є розпад тритію



з утворенням ядра гелію, електрона та антинейтрино. Енергія, яка виділяється під час цієї реакції, дорівнює  $E_{e\bar{\nu}} = 18,6$  КеВ. Вона розподіляється довільно між електроном і антинейтрино. Таким чином, максимальна енергія електрона не перевищує  $E_{e\bar{\nu}} = 18,6$  КеВ, що відповідає

його максимальній швидкості  $v_{e(\max)} = \sqrt{2E_{e\bar{\nu}}/m} \approx 8 \cdot 10^8$  см/с. Частинка з масою електрона  $m \approx 10^{-27}$  г і з такою швидкістю може бути локалізованою тільки в межах області із середньоквадратичним розміром  $\delta x \geq \hbar/2mv_{e(\max)} \approx 6 \cdot 10^{-10}$  см. Ця величина в 3000 разів перевищує діаметр ядра тритію, що показує неможливість існування електрона з такою енергією всередині ядра до його розпаду. Очевидно, що електрон утворюється в ядрі в момент розпаду;

б) за допомогою аналогічних розрахунків можна знайти відповідь на питання, чи може нейтрон перебувати в ядрі. Із моделі ядерної матерії відомо, що середня енергія нейтронів у будь-якому ядрі дорівнює величині  $E_n \approx 28 - 30$  МеВ, що з урахуванням маси нейтрона  $m_n \approx 1,7 \cdot 10^{-24}$  г відповідає середньоквадратичній швидкості нейтрона в межах ядра  $v_n = \sqrt{2E_n/m_n} \approx 6 \cdot 10^9$  см/с. Частинка з такими параметрами може бути локалізованою в межах області розміром  $\delta x \geq \hbar/2m_nv_n \approx 4 \cdot 10^{-14}$  см, що значно менше від розміру будь-якого ядра. Це підтверджує добре відомий факт про те, що нейтрони справді можуть міститися в об'ємі ядра, а саме ядро може складатися з протонів і нейтронів.

### Контрольні запитання

1. Якій похибці у величині швидкості відповідає твердження про локалізацію електрона на конкретній борівській орбіті?
2. Яка кутова розбіжність пучка моноенергетичних направлених електронів після проходження отвору радіуса  $R$  у непрозорому екрані?
3. Чи обмежує співвідношення невизначеностей можливість точного визначення, наприклад, координати нерелятивістської мікрочастинки?

**Література:** [1], § 9,10,15; [2], § 2,3; [3], § 1,2.

## § 3. Стаціонарне рівняння Шредінгера та принципи його розв'язання

### 3.1. Стаціонарне рівняння Шредінгера

Фундаментальне значення хвильової функції для розгляду та інтерпретації явищ мікросвіту може бути використаним тільки тоді, коли існує математично коректний метод визначення цієї функції для різних фізичних систем. Найважливіше значення має метод визначення хвильових функцій  $\Psi(\vec{r})$  за допомогою стаціонарного рівняння Шредінгера. Це рівняння постулював Е. Шредінгер у 1926 р. після досить парадоксального збігу обставин. Він, як і більшість вчених того часу, спочатку скептично ставився до гіпотези де Бройля про хвильові властивості матеріальних тіл, але під час підготовки доповіді колегам про цю модель, детально розглянувши наслідки, що випливають із цієї гіпотези, зрозумів її глибокий зміст і корисність її використання для опису руху частинок у довільних силових полях. Наслідком такого переосмислення було хвильове рівняння, яке описує рух матеріальних тіл. Шредінгер виходив з того, що хвильовий рух будь-якої природи у стаціонарному випадку має описуватися хвильовим рівнянням універсального вигляду

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + k^2(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = 0. \quad (3.1)$$

Добре відомо, що таке рівняння описує безліч різних хвильових процесів. У випадку руху мікрочастинки їх імпульс  $p(\vec{r})$  пов'язаний формулою Ейнштейна  $\vec{p}(\vec{r}) = \hbar\vec{k}(\vec{r})$  із хвильовим вектором  $\vec{k}(\vec{r})$  і водночас може бути виражений через повну та потенціальну енергії частинки:

$$p^2(\vec{r}) = 2m\{E - V(\vec{r})\} = \hbar^2 k^2(\vec{r}). \quad (3.2)$$

Підставляючи вираз для  $k^2(\vec{r})$ , що випливає з (3.2), у рівняння (3.1), отримуємо модифіковане хвильове рівняння

$$\Delta\Psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}\{E - V(\vec{r})\}\Psi(\vec{r}) = 0, \quad (3.3)$$

яке називають *стаціонарним рівнянням Шредінгера*. Це рівняння описує рух частинки з масою  $m$  у системі, де вона має потенціальну енергію  $V(\vec{r})$ . Звичайно, таке виведення рівняння (3.3) більше схоже

на його постулювання, що фактично й зробив Шредінгер у своїх перших роботах. Більш обґрунтоване виведення буде зроблено далі.

Оскільки розв'язком рівняння (3.3) є функція  $\Psi(\vec{r})$ , яка має зміст амплітуди ймовірності, то вона має задовольняти певні умови:

- скінченність;
- неперервність;
- однозначність;
- квадратичну інтегрованість і нормованість.

Окремо слід розглянути питання про граничні умови для похідної від хвильової функції. Ця умова може бути отримана з рівняння Шредінгера (3.3), яке в одновимірному випадку може бути переписане у вигляді рівності

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}\{V(x) - E\}\Psi(x) = 0.$$

Проінтегруємо обидві частини цього рівняння по нескінченно малому інтервалу  $[x - \Delta, x + \Delta]$  в околі довільної точки  $x$ :

$$\frac{d\Psi(x + \Delta)}{dx^2} = \frac{d\Psi(x - \Delta)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E \int_{x-\Delta}^{x+\Delta} \Psi(x')dx' + \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x-\Delta}^{x+\Delta} V(x')\Psi(x)dx' \quad (3.4)$$

і зробимо граничний перехід  $\Delta \rightarrow 0$ . При цьому перший інтеграл, ураховуючи скінченність  $\Psi(x)$ , стає рівним нулю, а другий можна спростити, виносячи із під знака інтегралу по нескінченно малому інтервалу функцію  $\Psi(x)$ . Остаточний вигляд для граничної умови для похідної від хвильової функції буде таким:

$$\frac{d\Psi(x + \Delta)}{dx^2} \Big|_{\Delta=0} = \frac{d\Psi(x - \Delta)}{dx^2} \Big|_{\Delta=0} + \frac{2m}{\hbar^2} \Psi(x) \int_{x-\Delta}^{x+\Delta} V(x')dx' \Big|_{\Delta=0}. \quad (3.5)$$

У випадку, коли потенціальна енергія в точці  $x$  не має сингулярності, виконується умова неперервності похідної

$$\frac{d\Psi(x + \Delta)}{dx^2} \Big|_{\Delta=0} = \frac{d\Psi(x - \Delta)}{dx^2} \Big|_{\Delta=0}. \quad (3.6, a)$$

У випадку сингулярного потенціалу, наприклад, у формі  $V(x) = V_0\delta(x)$  відбувається розрив похідної

$$\frac{d\Psi(x + \Delta)}{dx^2} \Big|_{\Delta=0} = \frac{d\Psi(x - \Delta)}{dx^2} \Big|_{\Delta=0} + \frac{2m}{\hbar^2} \Psi(x)V_0. \quad (3.6, б)$$

У деяких випадках, залежно від виду потенціальної енергії, можуть бути додаткові умови для хвильової функції. Якщо функція  $\Psi(\vec{r})$  не задовольняє перелічені умови, то їй відповідає така фізична система, яка не може бути реалізованою, тобто вона не існує. Немає підстави вважати, що всі без винятку розв'язки рівняння (3.3) будуть відповідати таким умовам. Виходячи з того, що єдиним довільним параметром у цьому рівнянні є повна енергія  $E$ , легко дійти висновку, що відповідність функції  $\Psi(\vec{r})$  даним умовам залежить саме від  $E$ .

Очевидно, що серед усіх можливих значень повної енергії може бути такий дискретний або неперервний набір значень  $E$ , за яких функція  $\Psi(\vec{r})$  не відповідатиме даним умовам, тобто відповідні стани принципово не можуть бути реалізованими, і навпаки, можуть бути такі дискретні значення  $E_1, E_2, E_3, \dots$  (або неперервно розподілені множини таких значень), за яких конкретні розв'язки рівняння (3.3) задовольнятимуть наперед ці умови. Виходячи із загальних положень математичної фізики, назвемо такі значення енергії  $E_1, E_2, E_3, \dots$  *власними значеннями*. Тільки таким власним значенням відповідають реально існуючі фізичні системи. Ті розв'язки рівняння (3.3), які знаходимо за конкретних власних значень, називають *власними розв'язками*, або *власними функціями*  $\Psi_1(\vec{r}), \Psi_2(\vec{r}), \Psi_3(\vec{r}), \dots$  рівняння. Якщо кожному власному значенню  $E_n$  відповідає одна власна функція  $\Psi_n(\vec{r})$ , то такі розв'язки називають *невиродженими*.

У тому випадку, коли одному власному значенню  $E_n$  відповідають кілька власних функцій  $\Psi_{n1}(\vec{r}), \Psi_{n2}(\vec{r}), \Psi_{n3}(\vec{r}), \dots$ , то такі розв'язки називають *виродженими*. Далі, при побудові загального математичного апарату квантової механіки буде показано, що різні власні функції є взаємно ортогональними і нормованими (ортонормованими). Вони утворюють повний набір (базис). Наявність такого базису приводить до того, що будь-яка хвильова функція  $\Psi(\vec{r})$ , задана в межах конкретної фізичної системи, може бути представлена у вигляді розкладу за набором власних функцій хвильового рівняння (3.3):

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}), \quad (3.7)$$

які знайдені в межах цієї системи. Умова нормованості буде залежати від виду спектра. Для випадку дискретного спектра ця умова має вигляд

$$\int_{V \rightarrow \infty} \Psi_n^*(\vec{r}) \Psi_m(\vec{r}) dV = \delta_{nm}. \quad (3.8, a)$$

У випадку неперервного спектра, який відповідає просторово необмеженому руху по окремій або усіх координатах, умова ортонормованості буде іншою:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p'). \quad (3.8, б)$$

З умови нормованості знаходять амплітуди хвильової функції. Наприклад, для одномірного вільного руху частинки умова нормованості відповідає (3.7, б) і з неї визначається амплітуда хвилі де Бройля (1.21):

$$\Psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp\{-i(Et \pm px)/\hbar\}. \quad (3.9)$$

Для більш детального з'ясування принципів і методів використання перелічених умов розглянемо деякі прості квантові системи.

### 3.2. Частинка в нескінченно глибокій одномірній прямокутній потенціальній ямі

Розглянемо можливі стани частинки з масою  $m$  у нескінченно глибокій одномірній прямокутній потенціальній ямі шириною  $l$  (рис. 3.1). У цій ямі потенціальна енергія має вигляд  $V(x) = 0$  при  $0 \leq x \leq l$  і  $V(x) = V_0 \rightarrow \infty$  при  $x < 0, x > l$ .

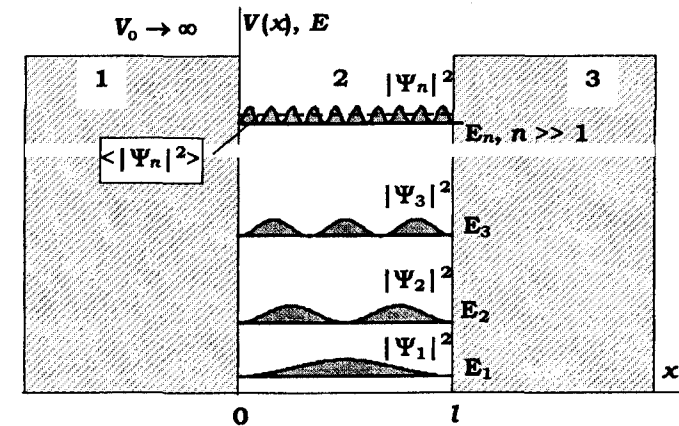


Рис. 3.1. Структура потенціальної ями та розташування одного високорозташованого і трьох найнижчих рівнів енергії та хвильових функцій

Стаціонарне рівняння Шредінгера (3.3) в областях 1 і 3, де  $V_0 \gg E$ , має вигляд

$$\frac{d^2\Psi^{(1,3)}(x)}{dx^2} - \beta^2\Psi^{(1,3)}(x) = 0, \beta = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}. \quad (3.10)$$

Розв'язки цього рівняння, які задовольняють умову скінченності хвильових функцій при  $x \rightarrow \pm\infty$  за довільної величини потенціальних бар'єрів  $V_0 > 0$ , мають вигляд монотонно спадаючих функцій

$$\Psi^{(1)}(x) = A_1 e^{\beta x}, \Psi^{(3)}(x) = B_3 e^{-\beta x}. \quad (3.11)$$

Якщо зробити граничний перехід  $V_0 \rightarrow \infty$ , якому відповідає граничне значення  $\beta \rightarrow \infty$ , то розв'язки набудуть остаточного вигляду

$$\Psi^{(1)}(x) = 0, \Psi^{(3)}(x) = 0. \quad (3.12)$$

Рівняння Шредінгера в області 2 має принципово інший вигляд:

$$\frac{d^2\Psi^{(2)}(x)}{dx^2} + k^2\Psi^{(2)}(x) = 0, k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}, \quad (3.13)$$

а його розв'язки є лінійною комбінацією осцилюючих функцій

$$\Psi^{(2)}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (3.14)$$

Величина  $k$  має зміст хвильового числа і характеризує вільний рух частинки в межах ями.

З умови неперервності хвильових функцій при  $x = 0$  знаходимо

$$\Psi_2(x) = 2iA \sin kx. \quad (3.15)$$

З умови неперервності при  $x = l$  маємо додаткову умову

$$\sin kl = 0, k = \frac{n\pi}{l}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.16)$$

Відсутність величини  $n = 0$  у (3.16) пов'язана з тим, що такому значенню  $n$  відповідає  $k = 0$ , а це призводить до нульової хвильової функції в ямі  $\Psi^{(2)}(x) \equiv 0$  (3.15), тобто до неможливості виконання обов'язкової умови нормування, що суперечить умові перебування частинки в ямі.

Після нормування функція (3.15) набуває остаточного вигляду

$$\Psi^{(2)}(x) \equiv \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} e^{i\alpha} \sin \frac{n\pi x}{l} \quad (3.17)$$

і відповідає всім вимогам власної функції. У (3.17)  $\alpha$  – довільна фаза хвильової функції, яку можна покласти рівною нулю.

Із (3.13) і (3.16) знаходимо остаточний вираз для власних значень енергії частинки в ямі:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ml^2}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.18)$$

Розподіл дозволених рівнів енергії  $E_n$  і відповідний розподіл густини ймовірності  $|\Psi_n(x)|^2$  для цих рівнів представлено на рис. 3.1.

Згідно із загальними принципами квантової механіки перехід до класичних характеристик (у т. ч. до неперервного розподілу дозволених станів енергії) має відбуватися при  $n \gg 1$ . На перший погляд здається, що завдяки квадратичному закону зростання дозволених значень енергії (3.18) ця умова буде порушуватися – дискретність зростає зі збільшенням номера рівня за законом  $E_n \sim n^2$ , але цей висновок невірний. Покажемо це.

Будь-яка експериментальна установка характеризується відносною точністю вимірювань  $(\Delta E/E)_{\text{експ}}$ . Саме із цією величиною слід порівняти вираз (3.13), з якого випливає величина відносної дискретності положення рівнів енергії  $(E_{n+1} - E_n)/E_n = (2n+1)/n^2$ . Із цього виразу видно, що при  $n \gg 1$  маємо, що відносна дискретність положення рівнів швидко спадає і  $(E_{n+1} - E_n)/E_n = 2/n \rightarrow 0$ . Наприклад, ямі з типом класичними параметрами  $l = 1$  см,  $m = 1$  г,  $E_n = 1$  ерг відповідає номер рівня  $n = 10^{27}$ . Для такого рівня відносна дискретність спектра надзвичайно мала, що набагато менше, ніж відносна точність вимірювань  $(\Delta E/E)_{\text{експ}}$  будь-якої експериментальної установки. Це стосується і питання про просторовий розподіл густини ймовірності локалізації частинки в класично дозволеному інтервалі  $0 \leq x \leq l$ . При  $n \gg 1$  період осциляцій квантово-механічної густини ймовірності  $W_{\text{кв}} = |\Psi_n(x)|^2$  зменшується пропорційно  $1/n$ , а сама густина ймовірності перетворюється на класичний аналог  $W_{\text{кл}} = \langle |\Psi_n(x)|^2 \rangle = 1/l$ .

### 3.3. Тунельний ефект

Хвильові властивості мікрочастинки виявляються в можливості проникнення мікрочастинки в класично недоступну область або проходження крізь таку область. Це явище називають *тунельним ефектом*.

том. Розглянемо два випадки його вияву. Задачу про проникнення мікрочастинки в об'єм бар'єра можна розглянути на прикладі її падіння на необмежений у напрямку осі  $x$  прямокутний бар'єр  $V(x) = 0$ ,  $x \leq 0$ ;  $V(x) = V_0$ ,  $x > 0$  (рис. 3.2.)

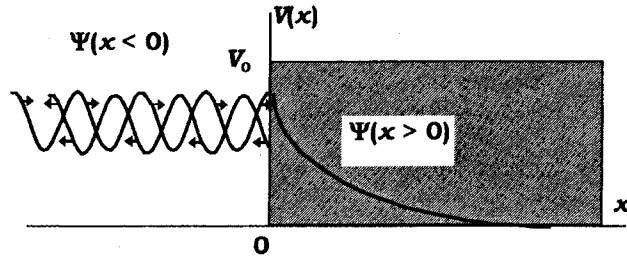


Рис. 3.2. Тунельний ефект на необмеженому прямокутному бар'єрі

Розв'язок рівняння Шредінгера (3.9) в області  $x \leq 0$  у випадку, коли енергія частинки  $E < V_0$ , відповідає суперпозиції двох плоских хвиль

$$\Psi(x \leq 0) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (3.19)$$

які характеризують вільний рух частинки у двох напрямках. Якщо згадати, що повна форма хвилі де Бройля (1.21) включає залежність від часу та координати у формі  $\Psi(x, t) \sim \exp\{i(\pm kx - (E/\hbar)t)\}$ , то легко переконатись, що перший розв'язок (пропорційний  $e^{ikx}$ ) відповідає частинці, яка рухається зліва направо в напрямку зростання  $x$ . Саме такому напрямку руху відповідає переміщення хвилі, при якому її фаза  $\varphi^{(+)} = kx - (E/\hbar)t$  залишається незмінною зі збільшенням часу. Вважатимемо, що частинка падає на бар'єр, рухаючись зліва направо вздовж осі  $x$ . Спектр дозволених значень енергії при такому вільному русі є неперервним. Другому розв'язку (пропорційному  $e^{-ikx}$ ) відповідає хвиля, незмінна фаза якої  $\varphi^{(-)} = -(kx + (E/\hbar)t)$  зі зростанням часу переноситься справа наліво в напрямку зменшення координати  $x$ .

Розв'язок рівняння (3.9) в області  $x > 0$  відповідає суперпозиції зростаючого і спадаючого полів:

$$\Psi(x > 0) = A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}. \quad (3.20)$$

Для необмежено протяжного бар'єра скінченність функції  $\Psi(x > 0)$  можна забезпечити лише за умови  $A_2 = 0$ .

З умови неперервності загальної хвильової функції та її похідної в точці  $x = 0$  можна знайти відповідні амплітуди відбитої хвилі та поля всередині бар'єра

$$b_1 \equiv B_1 / A_1 = \frac{k - i\beta}{k + i\beta}, \quad b_2 \equiv B_2 / A_1 = \frac{2k}{k + i\beta}. \quad (3.21)$$

Остаточно хвильова функція має вигляд

$$\Psi(x \leq 0) = A_1 \left( e^{ikx} + \frac{k - i\beta}{k + i\beta} e^{-ikx} \right), \quad (3.22)$$

$$\Psi(x > 0) = A_1 \frac{2k}{k + i\beta} e^{-\beta x}. \quad (3.23)$$

Загальний вигляд падаючої та відбитої хвиль  $\Psi(x < 0) \sim \exp(\pm ikr)$ , а також хвильового поля  $\Psi(x > 0) \sim \exp(-\beta r)$ , представлено символічно на рис. 3.2. Коефіцієнт відбиття мікрочастинки від необмеженого за розміром бар'єра визначається виразом

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{k - i\beta}{k + i\beta} \right|^2 = 1. \quad (3.24)$$

Із (3.23) випливає, що частинка може перебувати в класично недоступній області й повна ймовірність такої локалізації у випадку необмеженого прямокутного бар'єра дорівнює

$$W(x > 0) = \int_0^{\infty} |\Psi(x > 0)|^2 dx = |A_1|^2 \frac{4k^2}{(k^2 + \beta^2)\beta^2}. \quad (3.25)$$

Густина ймовірності локалізації в області бар'єра за рахунок явища тунелювання

$$|\Psi(x > 0)|^2 = |A_1|^2 \frac{4k^2}{(k^2 + \beta^2)} e^{-2\beta x} \quad (3.26)$$

швидко спадає зі зростанням відстані та збільшенням маси частинки й різниці  $V_0 - E$ , але вона ніколи не стає рівною нулю.

Відмінність хвильової функції від нуля в підбар'єрній області  $x > 0$  і пов'язана з цим відмінна від нуля густина ймовірності перебування частинки в класично недоступній області (3.26) є суттєво квантовим явищем, яке не має аналогів у класичній фізиці, якщо це стосується

матеріальних тіл. Воно є наслідком корпускулярно-хвильового дуалізму й добре узгоджується зі співвідношенням невизначеностей. З іншого боку, подібні явища добре відомі в класичній фізиці при поширенні хвиль різної природи (напр., при відбитті світла від діелектриків під кутом, що більший за кут повного відбиття).

Перебуванню частинки в класично недоступній області  $E < V_0$  відповідає уявний імпульс, абсолютна величина якого обмежена умовою  $|p| \leq \sqrt{2m(V_0 - E)}$ . Зі співвідношення невизначеностей Гейзенберга випливає, що при конкретному значенні  $p$  середньоквадратична невизначеність координати (тобто мінімальна область локалізації частинки  $\delta x$ ) буде не меншою від  $\hbar/2p$ . Далі, при побудові формалізованого апарату квантової механіки покажемо, що аналогічне співвідношення буде й у тому випадку, коли імпульс є уявним. Тоді замість  $p$  у розрахунках можна використовувати  $|p|$ . Приймаючи таке уточнення, можна оцінити розмір області недетермінізованої локалізації частинки в об'ємі бар'єра

$$\delta x \geq \delta x_{(\min)} \equiv \hbar / \sqrt{8m(V_0 - E)}, \quad (3.27)$$

який відповідає співвідношенню невизначеностей Гейзенберга.

З іншого боку, виходячи з явного вигляду хвильової функції в цій області  $\Psi(x > 0) \sim e^{-\beta x}$ , можна обчислити середньоквадратичний розмір області фактичної локалізації частинки в об'ємі бар'єра:

$$\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 1/\beta^2 = \hbar^2 / 4m(V_0 - E). \quad (3.28)$$

Оскільки  $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle} = \sqrt{2}\delta x_{(\min)}$ , то видно, що розмір області фактичної локалізації частинки задовольняє співвідношення невизначеностей.

Фізична модель процесу, яка пояснює можливість потрапляння частинки в об'єм бар'єра, пов'язана з тим, що обмеження області локалізації неминуче приводить до невизначеності імпульсу (у т. ч. до можливості великих флуктуацій імпульсу). У цьому випадку можливі великі флуктуації кінетичної енергії, які перевищують висоту бар'єра й дозволяють частинці потрапити в класично недоступну область.

Найбільш яскрава ілюстрація тунельного ефекту відповідає проходженню мікрочастинки крізь обмежений потенціальний бар'єр в області вільного руху. Розглянемо основні особливості цього ефекту у випадку прямокутного бар'єра, для якого  $V(x) = 0$ ,  $x \leq 0$ ,  $x \geq L$ ;  $V(x) = V_0$ ,  $0 < x < L$  (рис. 3.3).

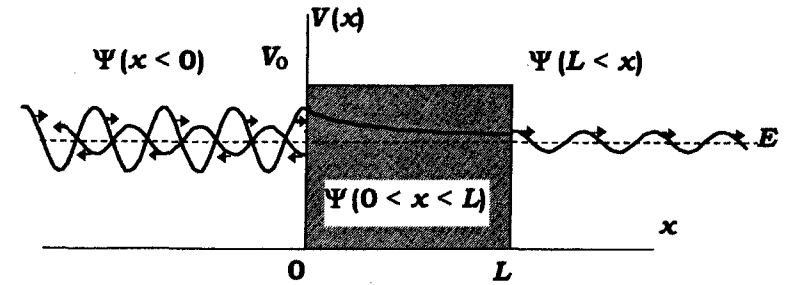


Рис. 3.3. Тунельний ефект на обмеженому прямокутному бар'єрі

Загальний розв'язок рівняння Шредингера (3.9) у випадку, коли енергія частинки  $E < V_0$ , має різний вигляд у різних областях:

$$\begin{aligned} \Psi(x \leq 0) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \\ \Psi(0 < x \leq L) &= A_2 e^{\beta x} + B_2 e^{-\beta x}, \quad \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \\ \Psi(L < x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Враховуючи, що частинка падає на бар'єр у точці  $x = 0$ , рухаючись зліва направо в напрямку зростання  $x$ , необхідно відкинути (поклавши  $B_3 = 0$ ) ту хвилю, яка падає на бар'єр у точці  $x = L$ , рухаючись справа наліво.

Амплітуди відповідних хвильових функцій  $B_1, A_2, B_2, A_3$  можна знайти, використовуючи граничні умови для функцій (3.29):

$$\begin{aligned} \Psi(x \rightarrow -0) &= \Psi(x \rightarrow +0), \quad \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow -0} = \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow +0}, \\ \Psi(x \rightarrow L-0) &= \Psi(x \rightarrow L+0), \quad \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow L-0} = \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x \rightarrow L+0}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Процес проходження мікрочастинки крізь бар'єр характеризує коефіцієнт  $A_3$ , який у найбільш цікавому випадку бар'єра із шириною  $L \gg 1/\beta$  має вигляд

$$A_3 = A_1 \frac{2\beta k e^{-ikL} e^{-\beta L}}{(\beta - ik)(k + i\beta)}, \quad (3.31)$$



якому відповідає коефіцієнт проходження

$$D = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4\beta^2 k^2 e^{-2\beta L}}{(\beta^2 + k^2)^2}. \quad (3.32, a)$$

У випадку бар'єра з довільною шириною маємо

$$D = \frac{1}{1 + \{(\beta^2 + k^2)/2\beta k\}^2 \operatorname{sh}^2 \beta L}. \quad (3.32, б)$$

Визначення коефіцієнта проходження при довільній формі бар'єра пов'язаний з більш складними розрахунками. Такі задачі розглянемо далі.

Цікаво порівняти (3.26, б) з коефіцієнтом проходження для випадку класично дозволеного руху (при  $E > V_0$ ). Для частинок з такою енергією виконується формальна заміна  $\beta \rightarrow iq = i\sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$  і вираз (3.26, б) набуває вигляду

$$D = \frac{1}{1 + \{(q^2 + k^2)/2qk\}^2 \sin^2 qL}. \quad (3.32, в)$$

Із (3.32, б) випливає, що коефіцієнт проходження  $D$  при  $E < V_0$  ніколи не дорівнює 1, але не дорівнює й 0. Цей результат принципово відмінний від розгляду на основі класичної фізики, коли  $D_{\text{кл}} \equiv 0$ . З іншого боку, у випадку  $E > V_0$ , для якого з розгляду на основі класичної фізики випливає  $D_{\text{кл}} \equiv 1$ , із (3.32, в) маємо результати, які можуть як збігатися з класичними, так і бути відмінними від них.

Зокрема, у випадку падіння частинки на бар'єр з неоптимальним розміром  $L \neq n\pi/q$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  із (3.32, в) випливає, що  $D < 1$ , причому при  $E \rightarrow V_0$  відбувається надбар'єрне відбиття, для якого  $D \rightarrow 0$ ,  $R \rightarrow 1$ . Для бар'єра з оптимальним розміром  $L = n\pi/q$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$  (або при оптимальній енергії рухомої частинки)

$$E = V_0 + (n\pi\hbar)^2 / 2mL \quad (3.33)$$

маємо принципово інший результат  $D \equiv 1$ ,  $R \equiv 0$ . Він демонструє можливість формування дискретних дозволених рівнів енергії в області формально вільного руху.

### Контрольні запитання

1. Пояснити, чи можна характеризувати стан частинки в об'ємі бар'єра швидкістю, якщо енергія частинки менша, ніж висота бар'єра?
2. Визначити, як співвідноситься невизначеність імпульсу та координати частинки, яка розміщена в межах бар'єра, з висотою і шириною потенціального бар'єра.
3. Чи може частинка проходити над потенціальним бар'єром без відбиття?

**Література:** [1], § 28; [2], § 6, 19, 22.

## § 4. Гармонічний осцилятор у класичній і квантовій механіці

### 4.1. Класична теорія гармонічного осцилятора

Гармонічний осцилятор є найбільш універсальною моделлю реальної фізичної системи. Важко навіть перелічити всі ті фізичні системи, зміна яких аналогічна процесам у гармонічному осциляторі. Це і коливальний рух атомів у кристалічній ґратці, і зміна електричного струму в  $LC$ -контурі, і колювання електричного й магнітного полів у резонаторі та багато інших явищ. Аналіз гармонічного осцилятора в класичному наближенні зручно робити на прикладі простого руху частинки в одновимірному параболічному потенціалі.

У теоретичній механіці *гармонічним осцилятором* називається система, де частинка вільно рухається в полі лінійної обертальної сили. Другий закон Ньютона для такої системи має вигляд

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F = -kx. \quad (4.1)$$

Розв'язками цього рівняння є сума двох гармонічних функцій. У загальному вигляді розв'язок можна записати у вигляді компактного виразу

$$x(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t \equiv a \sin(\omega t + \varphi), \quad \omega^2 = k/m, \quad (4.2)$$

у якому початкові умови задаються або сукупністю амплітуд  $A$  та  $B$ , або амплітудою  $a$  та початковою фазою  $\varphi$ . Частота коливань  $\omega$  визначається пружними характеристиками системи та масою частинки.

Класична швидкість та імпульс частинки характеризуються виразами

$$\begin{aligned} \dot{x} &= a\omega \cos(\omega t + \varphi) = a\omega \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}, \\ p_x &= ma\omega \cos(\omega t + \varphi) = ma\omega \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Із виразів (4.1) – (4.3) легко знайти кінетичну

$$T = \frac{m\dot{x}^2}{2} = \frac{m\omega^2 a^2}{2} \cos^2(\omega t + \varphi) \equiv \frac{m\omega^2 a^2}{2} \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right), \quad (4.4)$$

потенціальну

$$V = -\int_0^x F(x) dx = \frac{m\omega^2 a^2}{2} \sin^2(\omega t + \varphi) \equiv \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (4.5)$$

і повну

$$E = T + V = \frac{m\omega^2 a^2}{2} \quad (4.6)$$

енергії частинки в класичному одномірному осциляторі як функції часу або координати.

Вид потенціальної енергії  $V(x)$  частинки зображено на рис. 4.1. Траєкторія дозволеного руху частинки за конкретної енергії  $E$  представлена прямою горизонтальною лінією. Визначимо деякі характерні параметри класичного руху. Дозволені значення координати частинки в межах ями визначаються з умови, що швидкість частинки (4.3) на класично дозволеній траєкторії є дійсною функцією координати. Із цієї умови випливає, що в точках з координатами  $x = \pm a$  частинка зупиняється, а подальший рух у області  $|x| > a$  неможливий. Ці точки називаються *точками повороту*. Під час руху частинки між двома точками повороту відбувається неперервний перерозподіл потенціальної та кінетичної енергій – з наближенням до точок повороту потенціальна енергія зростає, а кінетична зменшується. Це зображе-

но на рис. 4.1 для довільної точки  $x_1$ . Водночас повна енергія частинки зберігається. При фіксованій масі та частоті коливань вона залежить тільки від амплітуди коливань. За повний період  $T_{\text{кол}} = 2\pi/\omega$  (тривалість одного повного коливання) частинка два рази проходить шлях між точками повороту. На основі отриманих виразів можна побудувати функцію для класичної густини ймовірності  $W_{\text{кл}}$  (класичний аналог квантово-механічної густини ймовірності  $W_{\text{кв}} = |\Psi(x)|^2$ ).

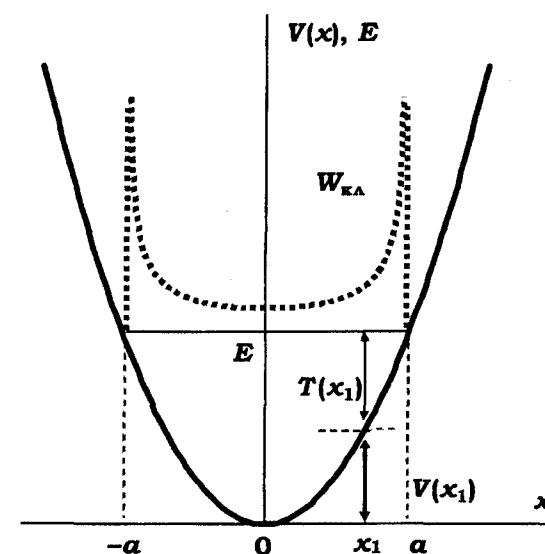


Рис. 4.1. Потенціальна енергія та характеристики класичного руху частинки в гармонічному осциляторі

Імовірність того, що частинка в гармонічному осциляторі перебуває в межах нескінченно малого інтервалу  $dx$  біля довільної точки  $x$ , визначається відношенням часу  $dt = dx/|\dot{x}|$ , за який частинка проходить цей інтервал, до часу  $T_{\text{кол}}/2 = \pi/\omega$ , що відповідає руху між двома точками повороту:

$$dP_{\text{кл}} = W_{\text{кл}} dx = \frac{dt}{T_{\text{кол}}/2} = dx / \pi \sqrt{1 - x^2/a^2}. \quad (4.7)$$

Із цього співвідношення знаходимо вираз для класичної густини ймовірності

$$W_{\text{кл}} = 1/a\pi\sqrt{1-x^2/a^2}. \quad (4.8)$$

Вигляд цієї функції для конкретного значення амплітуди коливань  $a$  представлено на рис. 4.1. Видно, що класична густина ймовірності має найменше значення в центрі, а найбільше – біля точок повороту. Такий характер  $W_{\text{кл}}$  є зрозумілим, він безпосередньо пов'язаний з особливостями зміни швидкості на дозволеній траєкторії – у центрі потенціальна енергія мінімальна, а кінетична – максимальна. Це відповідає максимальній швидкості та мінімальному часу перебування в межах інтервалу  $dx$ , що відповідає малій густині ймовірності. Навпаки, біля точок повороту потенціальна енергія досягає свого найбільшого в межах дозволеної траєкторії значення, а кінетична – мінімального. Дуже мала швидкість класичного руху в околі цієї точки приводить до великої ймовірності перебування в межах інтервалу  $dx$ , тобто і до великого значення густини ймовірності. Далі розглянемо особливості квантового руху частинки в цій самій системі  $dx$ , потім порівняємо ці результати.

## 4.2. Квантова теорія гармонічного осцилятора

Відповідно до розглянутих вище загальних особливостей квантово-механічного опису фізичних систем аналіз стану частинки в силовому полі можна проводити на основі аналізу розв'язків стаціонарного рівняння Шредінгера (3.3) з урахуванням особливостей конкретного виразу для потенціальної енергії. Використовуючи отриманий вираз (4.5), перепишемо (3.3) у вигляді

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right\} \Psi(x) = 0. \quad (4.9)$$

Необхідно знайти власні функції та власні значення енергії цього рівняння. Спочатку спростимо рівняння (4.9), ввівши допоміжні параметри  $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$  і  $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$ , перший з яких має розмірність коор-

динати й є характерною амплітудою, а другий – безрозмірна енергія. Після заміни змінної  $\xi = x/x_0$  приходимо до рівняння

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\Psi(\xi) = 0. \quad (4.10)$$

Спочатку знайдемо асимптотичний розв'язок (4.10) при  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . У цій області рівняння набуває асимптотичного вигляду

$$\frac{d^2\Psi_\infty(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\Psi_\infty(\xi) = 0. \quad (4.11)$$

Розв'язок шукаємо у вигляді функції  $\Psi_\infty(\xi) = A_\alpha e^{\alpha\xi^2}$ . Після підстановки  $\Psi_\infty(\xi)$  у (4.11) і врахування умови  $\xi \gg \alpha$  отримуємо  $\alpha = \pm 1/2$ . Відкидаючи розв'язок з додатним параметром  $\alpha = 1/2$  (він відповідає необмежено зростаючій функції, від нього можна відмовитись, поклавши  $A_{\alpha=1/2} = 0$ ), остаточно знаходимо

$$\Psi_\infty(\xi) = A_{-1/2} e^{-\xi^2/2}. \quad (4.12)$$

Загальний розв'язок рівняння (4.10) шукаємо у вигляді функції

$$\Psi(\xi) = C f(\xi) e^{-\xi^2/2}. \quad (4.13)$$

Після підстановки (4.13) у (4.10) приходимо до рівняння стосовно функції  $f(\xi)$ :

$$\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{df(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1)f(\xi) = 0. \quad (4.14)$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді степеневого ряду

$$f(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s \xi^s. \quad (4.15)$$

Після відповідної підстановки отримуємо рівняння, яке містить дві суми

$$\sum_{s=0}^{\infty} a_s s(s-1) \xi^{s-2} - \sum_{s=0}^{\infty} a_s (2s+1-\varepsilon) \xi^s = 0. \quad (4.16)$$

У першій сумі два перших доданки тотожно рівні нулю, а підсумовування починається із члена з  $s = 2$ . Враховуючи цю обставину, можна перетворити цю суму на вигляд, подібний другій сумі. Для цього спочатку зробимо в першій сумі формальну заміну індексу  $s \rightarrow s'$ , а по-

тім зворотню заміну у вигляді підстановки  $s' = s + 2$ . Після таких перетворень рівняння (4.16) матиме вигляд співвідношення

$$\sum_{s=0}^{\infty} \{a_{s+2}(s+2)(s+1) - a_s(2s+1-\varepsilon)\} \xi^s = 0, \quad (4.17)$$

яке має виконуватися за всіх значень координати  $-\infty < \xi < \infty$ . Таку умову можна виконати, якщо відповідна комбінація коефіцієнтів у фігурних дужках тотожно дорівнює нулю. Із цієї умови отримуємо рекурентне співвідношення між коефіцієнтами ряду (4.15):

$$a_{s+2} = \frac{2s+1-\varepsilon}{(s+1)(s+2)} a_s. \quad (4.18)$$

Це рекурентне співвідношення дозволяє виразити всі парні коефіцієнти  $a_{2s}$  через  $a_0$ , а непарні  $a_{2s+1}$  – через  $a_1$ .

Легко впевнитись, що загальні розв'язки (4.13) і (4.15) у будь-якій симетричній потенціалній ямі мають містити тільки парні або тільки непарні степені координати. Для цього зауважимо, що хвильову функцію (4.13) завжди можна представити як суму парної та непарної функцій

$$\Psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} \{F_0(\xi) + \xi F_1(\xi)\}, \quad (4.19)$$

$$F_0(\xi) = a_0 + a_2 \xi^2 + a_4 \xi^4 + \dots, \quad F_1(\xi) = a_1 + a_3 \xi^2 + a_5 \xi^4 + \dots$$

У цьому розкладі ряди  $F_0(\xi)$  і  $F_1(\xi)$  є парними функціями.

Якщо врахувати, що в симетричній ямі ймовірність перебування частинки в різних місцях ями є парною функцією координати  $|\Psi(\xi)|^2 = |\Psi(-\xi)|^2$ , то з цієї умови випливає вимога

$$|F_0(\xi) + \xi F_1(\xi)| = |F_0(-\xi) - \xi F_1(-\xi)| = |F_0(\xi) - \xi F_1(\xi)|. \quad (4.20)$$

Вимога (4.20) може бути виконаною лише тоді, коли  $F_0(\xi) \neq 0, F_1(\xi) \equiv 0$  або  $F_0(\xi) \equiv 0, F_1(\xi) \neq 0$ . Цей результат свідчить, що стан частинки в будь-якій симетричній потенціалній ямі може описуватися або парними, або непарними функціями. Будь-який із цих розв'язків може залежати, після використання (4.18), тільки від одного коефіцієнта: парні від  $a_0$ , а непарні від  $a_1$ . Формально розв'язок рівняння (4.7) на цьому можна вважати закінченим, але отримані розв'язки ще не є власними функціями. Необхідно додатково перевірити, чи задовольняють вони необхідні умови, зокрема умову скінченності.

Із вигляду рекурентного співвідношення (4.18) випливає, що при  $s \gg 1$  виконується співвідношення  $a_{s+2}/a_s = 2/s$ . Безпосередня перевірка показує, що такий самий вираз  $b_{s+2}/b_s = 2/s$  справедливий для співвідношення сусідніх коефіцієнтів для розкладу у степеневий ряд функції:

$$\exp(\xi^2) = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + \dots + \frac{\xi^s}{(s/2)!} + \frac{\xi^{s+2}}{((s/2)+1)!} + \dots \quad (4.21)$$

Однаковий вираз для рекурентних співвідношень функцій (4.15) і (4.21) свідчить про те, що в області  $\xi \rightarrow \pm\infty$  відбувається асимптотичне наближення  $f(\xi) \rightarrow \exp(\xi^2)$ , яке приводить до асимптотичного вигляду загальної хвильової функції (4.13)  $\Psi(\xi) \rightarrow C e^{\xi^2/2}$  у цій області. Оскільки ця функція розходиться при  $\xi \rightarrow \pm\infty$ , то вона не може бути власною функцією. Цей результат є очікуваним і його вже отримано при окремому аналізі розв'язків асимптотичного рівняння (4.11).

Для забезпечення скінченності хвильової функції  $\psi(\xi)$  при  $\xi \rightarrow \pm\infty$ , необхідно забезпечити умови перетворення нескінченного степеневого ряду (4.15) у скінченний багаточлен. Прямий аналіз структури рекурентного співвідношення (4.18) показує, що таке перетворення можливе, якщо хоча б один із коефіцієнтів цього ряду буде дорівнювати нулю. Оскільки всі наступні коефіцієнти ряду виражаються через будь-який попередній, то це приведе до рівності нулю всіх наступних коефіцієнтів. Для такого обриву ряду та відповідного забезпечення скінченності хвильової функції  $\psi(\xi)$  необхідно виконання умови

$$\varepsilon = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.22)$$

У цьому випадку функція  $f(\xi)$  матиме вигляд полінома  $f(\xi) = \sum_{s=0}^n a_s \xi^s$

з максимальною степенем  $x^n$  незалежної змінної. У математиці такий поліном зі зв'язком коефіцієнтів у формі рекурентного співвідношення (4.15)  $a_{s+2}/a_s = 2(s-n)/(s+1)(s+2)$  був досліджений задовго до його використання у квантовій механіці. Його називають *поліномом*

*Ерміта*  $f(\xi) = \sum_{s=0}^n a_s \xi^s \equiv H_n(\xi)$  і визначають диференціальним співвідношенням, яке приводить до степеневому ряду

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \equiv (2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2\xi)^{n-4} \dots \quad (4.23)$$

Остаточний вираз для власної хвильової функції (4.13)  $\Psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$  можна знайти після визначення коефіцієнта нормування

$$C_n = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2} dx \right\}^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{x_0 n! 2^n \sqrt{\pi}}} \quad (4.24)$$

Він має вигляд

$$\Psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (4.25)$$

Власні функції  $\psi_n(\xi)$  є дійсними і взаємно ортогональними

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n(x/x_0) \Psi_m(x/x_0) dx = \delta_{nm} \quad (4.26)$$

Умова (4.22) визначає ті власні значення енергії гармонічного осцилятора

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.27)$$

за яких усі відповідні розв'язки рівнянь (4.9) і (4.10) будуть власними функціями. Видно, що спектр рівнів енергії гармонічного осцилятора є еквідистантним, причому найнижчий рівень енергії  $E_0 = \hbar\omega/2$  відмінний від нуля.

Наведемо явний вигляд  $\Psi_n(\xi)$  і  $|\Psi_n(\xi)|^2$  для кількох найнижчих станів

$$\begin{aligned} \Psi_0(\xi) &= C_0 e^{-\xi^2/2}, & |\Psi_0(\xi)|^2 &= C_0^2 e^{-\xi^2}, \\ \Psi_1(\xi) &= (\sqrt{2}C_0)\xi e^{-\xi^2/2}, & |\Psi_1(\xi)|^2 &= 2|C_0|^2 \xi^2 e^{-\xi^2}, \\ \Psi_2(\xi) &= 2C_0\left(\xi - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\left(\xi + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)e^{-\xi^2/2}, & |\Psi_2(\xi)|^2 &= 4|C_0|^2 \left(\xi^2 - \frac{1}{2}\right)^2 e^{-\xi^2}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Графіки функцій  $|\Psi_n(\xi)|^2$  для цих станів представлені на рис. 4.2.

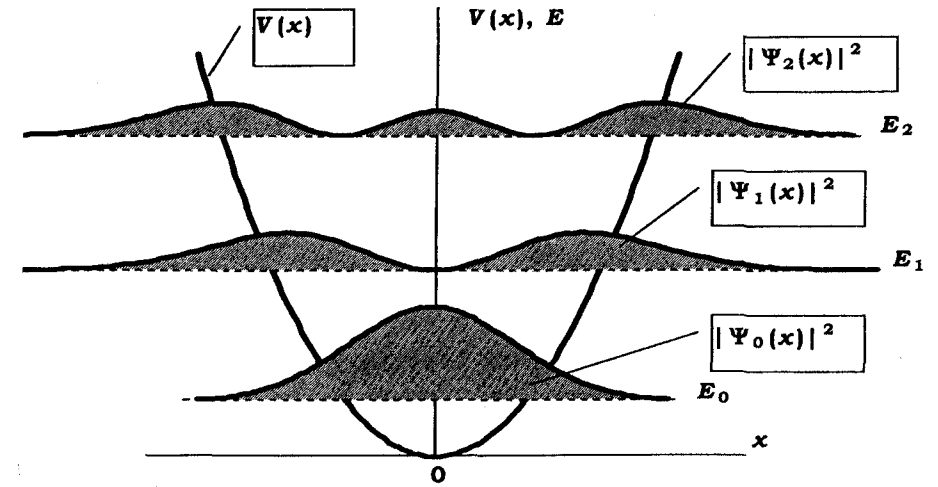


Рис. 4.2. Розподіл густини ймовірності локалізації частинки на різних рівнях квантованого руху в параболічному потенціалі

Аналіз явного вигляду поліномів Ерміта показує, що кількість нулів відповідної хвильової функції  $\Psi_n(\xi)$  дорівнює квантовому номеру цього рівня. Ці результати також випливають з наведених прикладів для  $\Psi_n(\xi)$  і з даних, представлених на рис. 4.2. З отриманих результатів випливає дуже істотна відмінність характеристик гармонічного осцилятора, обчислених на основі рівняння Шредінгера від аналогічних характеристик, знайдених вище на основі класичного рівняння руху.

Немає сумніву у справедливості квантово-механічного опису для мікрочастинок у суттєво квантовій області (для найнижчих рівнів енергії). Так само немає підстав сумніватися у справедливості класичного опису для макроскопічного осцилятора. Згідно з принципом відповідності квантово-механічний опис має асимптотично переходити в класичний при збільшенні енергії частинки, що відповідає збільшенню номера квантового рівня. Покажемо, що такий перехід справді існує:

а) для класичного опису дискретність дозволених рівнів енергії відсутня. При квантово-механічному описі відносна дискретність рівнів необмежено зменшується при переході до макроскопічних параметрів

$$\eta = \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{1}{n} \rightarrow 0 \quad \text{при } n \rightarrow \infty; \quad (4.29)$$

б) вираз для класичної густини ймовірності має вигляд  $W_{\text{кл}} = 1/a\pi\sqrt{1-(x/a)^2}$  (див. рис. 4.1) і на перший погляд принципово відрізняється від квантово-механічного аналога  $W_{\text{кв}} = |\Psi_n(x)|^2$  (див. рис. 4.2), для якого характерна наявність кількох просторових максимумів і мінімумів (нулів). Більш детальний аналіз показує, що при зростанні номера рівня просторова структура інтенсивності хвильової функції  $|\Psi_n(x)|^2$  змінюється, тобто виникають нові максимуми та мінімуми.

Кількість нулів функції  $|\Psi_n(x)|^2$  дорівнює номеру рівня  $n$ . При  $n \gg 1$  кількість просторових осциляцій величини  $|\Psi_n(x)|^2$  стає настільки великою, що вони практично зливаються. Це приводить до перетворення осцилюючої функції  $|\Psi_n(x)|^2$  на усереднену функцію  $\langle |\Psi_n(x)|^2 \rangle$ , вигляд якої повністю збігається з класичною густиною ймовірності  $W_{\text{кл}} = 1/a\pi\sqrt{1-(x/a)^2}$  (рис. 4.3).

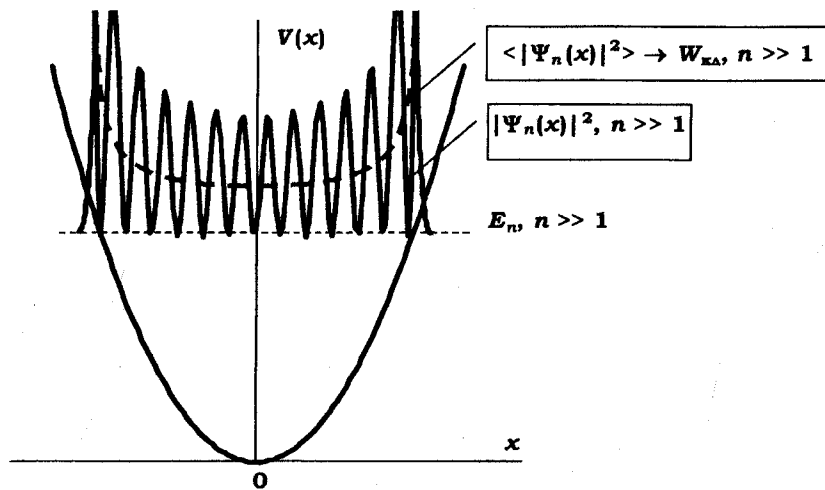


Рис. 4.3. Схема "перетворення" квантово-механічної густини ймовірності  $W_{\text{кв}} = |\Psi_n(x)|^2$  на класичну  $W_{\text{кл}} = 1/a\pi\sqrt{1-(x/a)^2}$  при переході до великих квантових чисел

Таким чином, у гармонічному осциляторі, як і в інших квантових системах, виконується принцип відповідності – переходу квантово-механічного опису явища до класичного при зростанні параметрів системи.

### 4.3. Нульова енергія гармонічного осцилятора і співвідношення невизначеностей Гейзенберга

Наявність відмінної від нуля мінімальної енергії будь-якої квантово-механічної системи є наслідком корпускулярно-хвильового дуалізму і, внаслідок цього, величина такої енергії має узгоджуватися зі співвідношенням невизначеностей, яке в полі симетричного параболічного потенціалу має вигляд  $\langle p_x^2 \rangle \langle x^2 \rangle \geq \hbar^2/4$ . Загальний вираз для енергії гармонічного осцилятора визначається формулою

$$E = T + V = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (4.30)$$

За фіксованої величини  $E$  ця енергія не залежить від координати та імпульсу частинки й залишається незмінною, якщо провести усереднення правої частини формули (4.30):

$$E \equiv \langle E \rangle = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2}. \quad (4.31)$$

Якщо замінити в цій формулі дисперсію імпульсу  $\langle p_x^2 \rangle$  на величину  $(\hbar^2/4 \langle x^2 \rangle) \leq \langle p_x^2 \rangle$ , яка не перевищує  $\langle p_x^2 \rangle$ , то вираз (4.31) перетвориться на нерівність

$$E \geq \frac{\hbar^2}{2m \langle x^2 \rangle} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2}. \quad (4.32)$$

Мінімум правої частини цієї формули відповідає оптимальній дисперсії координати

$$\langle x^2 \rangle_{\text{опт}} = \frac{\hbar}{2m\omega}. \quad (4.33)$$

Для такої дисперсії із формули (4.31) знаходимо

$$E_{\text{min}} = \hbar\omega/2. \quad (4.34)$$



Проведене обчислення показує, що мінімальна енергія частинки в гармонічному осциляторі є прямим наслідком співвідношення невизначеностей Гейзенберга і точно збігається з оцінкою, яка базується на граничному значенні  $(\langle p_x^2 \rangle \langle x^2 \rangle)_{\min} = \hbar^2 / 4$  цього співвідношення. Слід зауважити, що такий результат справедливий лише для параболічного потенціалу.

#### Контрольні запитання

1. Як залежить частота класичних коливань частинки в параболічному потенціалі з фіксованою амплітудою від маси частинки та амплітуди потенціалу за однакової ширини ями?
2. Хвильова функція частинки в основному стані в гармонічному осциляторі відмінна від нуля для будь-якого значного відхилення від положення рівноваги. Як це узгоджується зі співвідношенням невизначеностей Гейзенберга?
3. Як співвідноситься енергія переходу між сусідніми рівнями в гармонічному осциляторі з частотою класичних коливань у тій самій системі?

**Література:** [1], § 47; [2], § 20.

## Розділ II

### ФОРМАЛЬНИЙ АПАРАТ ОПИСУ СТАЦІОНАРНИХ І НЕСТАЦІОНАРНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

#### § 5. Постулати квантової механіки. Загальні співвідношення невизначеностей Гейзенберга – Робертсона та Шредінгера – Робертсона

##### 5.1. Постулати квантової механіки

Розглянуті вище моделі та системи, а також методи їх адекватного опису, наочно демонструють особливості динаміки мікрочастинок і важливість використання ймовірнісної інтерпретації. Водночас все це поки не об'єднано спільним ідейно-розрахунковим апаратом, а представляє собою набір певних правил до конкретних задач. Такий підхід був характерним на початковому етапі розвитку квантової теорії.

При першому ознайомленні з квантовою механікою він необхідний для з'ясування деяких принципових відмінностей опису та аналізу явищ мікросвіту від опису явищ, характерних для макроскопічних систем. Без такого попереднього вступу перехід до побудови формалізованого математичного апарату квантової механіки був би пов'язаний з багатьма суто ідейними перешкодами. Перейдемо до розгляду загальних положень.

Квантова механіка базується на системі постулатів, які є формалізованим відображенням реальних явищ і об'єктів.

**Постулат 1.** Кожному стану фізичної системи відповідає функція стану (хвильова функція)  $\Psi(q)$ , яка з максимально можливою повнотою описує цей стан. Нічого іншого, окрім того, що містить хвильова функція, ми не можемо знати про цю систему.

**Постулат 2.** Кожній фізичній величині у квантовій механіці ставиться у відповідність лінійний самоспряжений (ермітовий) оператор  $\hat{L}$ .

**Постулат 3.** Співвідношення між конкретною фізичною величиною  $L$  та її оператором  $\hat{L}$  визначається з умови рівності експериментально виміряного середнього значення цієї величини в даній системі і розрахованого середнього значення (розрахованого математичного очікування), яке визначається дією

$$\langle L_{\text{експ}} \rangle \Leftrightarrow \langle L_{\text{розрах}} \rangle = \int \Psi^* \hat{L} \Psi dq. \quad (5.1)$$

Проаналізуємо ці постулати, у яких базовими поняттями є: стан фізичної системи, його хвильова функція та поняття оператора фізичної величини.

У символічному вигляді зіставлення між станом фізичної системи та хвильовою функцією  $\Psi(q)$  представлено на рис. 5.1, а. Ця функція має зміст амплітуди ймовірності, у силу чого вона є скінченною, неперервною, квадратично інтегрованою та нормованою. У ряді випадків можуть бути додаткові умови. Наприклад, у симетричному відносно інверсії координати потенціальному полі  $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$  імовірність локалізації в симетричних точках  $\pm x$  буде однаковою, тобто функція  $|\Psi(\vec{r})|^2$  має бути парною. З умови  $|\Psi(-\vec{r})|^2 = |\Psi(\vec{r})|^2$  випливає, що  $\Psi(-\vec{r}) = e^{i\beta} \Psi(\vec{r})$ , де  $\beta$  – дійсна фаза. При повторній інверсії координати маємо  $e^{2i\beta} = 1$ , що відповідає умові  $e^{i\beta} = \pm 1$ . Цей результат свідчить, що в симетричному (відносно початку координат) потенціальному полі хвильова функція частинки може бути тільки парною або непарною:  $\Psi(-\vec{r}) = \pm \Psi(\vec{r})$ .

Зв'язок між різними станами базується на фундаментальному принципі квантової механіки – принципі суперпозиції. У стислій формі він складається з двох тверджень:

- якщо довільна квантова система може перебувати у станах, які описуються різними хвильовими функціями  $\Psi_1(q), \Psi_2(q), \Psi_3(q), \dots$ , то вона може також перебувати у стані  $\Psi(q) = \sum_c c_n \Psi_n(q)$ , який є лінійною суперпозицією цих функцій;

- функції  $\Psi_n(q)$  та  $c\Psi_n(q)$  описують один і той самий стан системи. Завдяки цьому принципу існує можливість інтерференції різних станів.

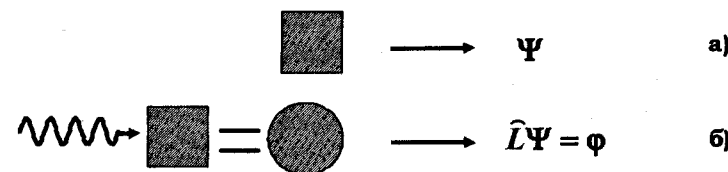


Рис. 5.1. Схематичне зображення правила відповідності між станом реальної фізичної системи та дією щодо конкретної фізичної величини  $L$  у ній і математичним відображенням хвильової функції цієї системи  $\Psi$  (а) та оператором  $\hat{L}$ , який відповідає цій фізичній величині (б).

Під фізичною величиною будемо розуміти величину, яку можна виміряти в експерименті. У реальному світі фізичних об'єктів і явищ у кожній із фізичних систем можна виконувати певні операції, пов'язані з конкретною фізичною величиною. Унаслідок таких операцій відбувається зміна цієї системи. У символічному вигляді цей процес зображено в лівій частині рис. 5.1, б.

Формалізованою мовою апарату квантової механіки можна сказати, що конкретній фізичній величині  $L$  ставиться у відповідність оператор  $\hat{L}$ , а процедура зміни стану фізичної системи  $\Psi(q)$  під дією цього оператора з перетворенням її на інший стан  $\varphi(q)$  зображається рівнянням

$$\hat{L}\Psi(q) = \varphi(q). \quad (5.2)$$

Це зіставлення зображено в правій частині рис. 5.1, б.

З'ясуємо умови, які стосуються правила введення оператора фізичної величини. Насамперед визначимо поняття оператора. Оператор – це сукупність математичних правил, дій, процедур, операцій, за до-

помогою яких одній функції ( $\Psi$ ) ставиться у відповідність інша ( $\phi$ ). Таким чином, рівність (5.2) є означенням змісту конкретного оператора  $\hat{L}$ . Дуже важливою є та обставина, що кожній фізичній величині можна поставити у відповідність єдиний оператор, отже, явний вид цього оператора може бути визначений у простій фізичній системі, а далі використаний без обмежень.

Поняття оператора опосередковано було використано вище в п. 2.2 при розгляді співвідношення невизначеностей Гейзенберга, де було показано, що формальна заміна однієї компоненти імпульсу  $p_x$  частинки на символічну операцію

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.3, a)$$

не змінює результатів розрахунку, але значно спрощує процедуру обчислення таких середніх величин, як середній імпульс і дисперсія імпульсу. Таким чином, можна вважати, що ця величина й є оператором однієї компоненти імпульсу.

Іншим прикладом є оператор координати

$$\hat{x} = x, \quad (5.3, б)$$

який, як видно з процедури визначення дисперсії координати (2.17), збігається із самою координатою. Причина, згідно з якою деякі з операторів можуть збігатися із самою величиною, та умови, коли це відбувається, будуть з'ясовані далі.

Продовжимо розгляд правил введення операторів фізичних величин. Оператор є лінійним, якщо виконується умова

$$\hat{L} \sum_n c_n \Psi_n(q) = \sum_n c_n \hat{L} \Psi_n(q). \quad (5.4)$$

Лінійність операторів фізичних величин забезпечує виконання принципу суперпозиції. Наприклад, оператор  $\hat{L} = \sqrt{\quad}$  не є лінійним і немає такої фізичної величини, якій можна поставити його у відповідність. Водночас оператори  $\hat{p}_x$  та  $\hat{x}$  є лінійними.

Існують певні правила алгебри операторів. Оператори можна додавати (віднімати) і множити. Сума двох або більшої кількості операторів  $\hat{L} = \sum_k \hat{L}_k$  визначається з умови однакової дії суми операторів

$\sum_k \hat{L}_k$  і сумарного оператора  $\hat{L}$  на одну й ту саму функцію

$$\hat{L} \Psi(q) = \sum_k \hat{L}_k \Psi(q).$$

Множення операторів  $\hat{L} = \hat{L}_n \hat{L}_m \dots \hat{L}_k$  визначається як процедура послідовної дії операторів  $\hat{L}_n, \hat{L}_m, \dots, \hat{L}_k$ , починаючи з того оператора  $\hat{L}_k$ , який розташований безпосередньо перед функцією  $\Psi(q)$  і діє на неї:

$$[\hat{L}\hat{M}] \hat{L} \Psi(q) = \hat{L}_n \left( \hat{L}_m \left( \dots \left( \hat{L}_k \Psi(q) \right) \right) \right) \equiv \hat{L}_n \hat{L}_m \dots \hat{L}_k \Psi(q).$$

Результат дії будь-якої пари операторів може залежати від порядку їх дії на функцію, тобто від порядку їх розташування при множенні операторів. Для того, щоб врахувати цю обставину, використовується різниця дії двох операторів  $\hat{L}$  і  $\hat{M}$ , розташованих у різному порядку  $(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})\Psi(q)$ . Така комбінація операторів називається *комутатором операторів* і позначається виразом

$$[\hat{L}\hat{M}] = (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}). \quad (5.5)$$

Оператори називаються *комутуючими*, якщо результат їх дії на довільну хвильову функцію дорівнює нулю  $[\hat{L}\hat{M}]\Psi(q) = 0$ , а *некомутуючими*, якщо  $[\hat{L}\hat{M}]\Psi(q) \neq 0$ . У символічній формі умова комутації має вигляд  $[\hat{L}\hat{M}] = 0$ . Оператори (5.3, а, б) не комутують між собою, а їх комутатор дорівнює величині  $[x\hat{p}_x] = i\hbar$ . Процедури ділення на оператор не існує.

Таким чином, використовуючи правила алгебри операторів, можна виконувати найпростіші алгебраїчні дії, і знаючи одні оператори, які відповідають "простим" фізичним величинам (напр., координаті, імпульсу тощо), можна отримувати інші оператори, які в класичному вигляді відповідають складній комбінації цих "простих" величин. Завдяки цьому побудову операторів складних фізичних величин можна здійснювати не на основі незручного для практичного використання загального співвідношення (5.1), а за допомогою перетворення складного за структурою класичного виразу цієї величини, яке містить у собі, наприклад, різні комбінації більш простих величин, оператори яких ми знаємо. Наприклад, оператор повного імпульсу будується з операторів типу (5.3, а) при використанні правила додавання

$$\hat{p} = \vec{e}_x \hat{p}_x + \vec{e}_y \hat{p}_y + \vec{e}_z \hat{p}_z = -i\hbar \nabla. \quad (5.6)$$

Аналогічним чином на основі класичних виразів для кінетичної, потенціальної та повної енергії (остання в консервативних системах збігається із функцією Гамільтона  $H$ ) будуються оператори цих величин (у т. ч. відповідний оператор Гамільтона  $\hat{H}$ ):

$$T = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta,$$

$$V(\vec{r}) \rightarrow \widehat{V}(\vec{r}) \equiv V(\vec{r}),$$

$$E = T + V \rightarrow \widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V. \quad (5.7)$$

Інколи при такій побудові операторів, які відповідають складним фізичним величинам, можуть виникати труднощі, пов'язані з тим, що в класичному виразі  $F(L)$  величина  $L$ , яку треба ототожнити з оператором  $\widehat{L}$ , розташована таким чином, що її не можна безпосередньо або однозначно перетворити на оператор.

Наприклад, при перетворенні функції  $F = c/L$  пряма заміна  $L \rightarrow \widehat{L}$  і  $F \rightarrow \widehat{F} = c/\widehat{L}$  є некоректною, оскільки процедури ділення на оператор не існує. Коректною в даному випадку є така послідовність перетворень: спочатку привести класичний вираз  $F(L)$  до вигляду, який містить лише дозволені дії (додавання, віднімання та множення), а потім перейти до підстановки операторів  $F(L) \rightarrow \widehat{F}(\widehat{L})$ . Найпростішим методом початкового приведення  $F(L)$  до такого вигляду, який має тільки три дозволені операції, є розклад  $F(L)$  у нескінченний ряд Тейлора за степенями  $A - L$  з наступною заміною  $L \rightarrow \widehat{L}$ :

$$\begin{aligned} F(L) = c/L &= c/\{A - (A - L)\} = \\ &= (c/A) \sum_{n=0}^{\infty} (1 - L/A)^n \rightarrow \widehat{F}(\widehat{L}) = (c/A) \sum_{n=0}^{\infty} (1 - \widehat{L}/A)^n. \end{aligned}$$

Інший приклад відповідає тому випадку, коли вихідний класичний вираз містить величини, які при переході до операторної форми не комутують між собою (напр., функція  $F = \exp(ip_x x / \hbar)$ ). Очевидно, якщо в класичному виразі можна без вагань робити заміну  $p_x x \leftrightarrow x p_x$ , то при переході до операторної форми це приведе до принципово різних виразів. Коректний шлях переходу до операторної форми полягає в тому, що треба ще в класичному виразі зробити такі перетворення, які знімають поставлене питання про порядок розташування при переході до операторів. Правильним кроком є така заміна:

$$F = \exp\left(i \frac{p_x x + x p_x}{2\hbar}\right) \rightarrow \widehat{F} = \exp\left(i \frac{\widehat{p}_x \widehat{x} + \widehat{x} \widehat{p}_x}{2\hbar}\right).$$

Ще одна умова, яку містить другий постулат, вимагає, щоб оператор фізичної величини був самоспряженим (ермітовим). У формалізо-

ваному вигляді цю умову можна записати у формі такого інтегрального рівняння:

$$\int_V \Psi_n^*(q) \widehat{L}(q) \Psi_m(q) dq = \int_V \Psi_m(q) \widehat{L}^*(q) \Psi_n^*(q) dq. \quad (5.8)$$

Зміст цієї вимоги полягає в тому, що середні та власні значення будь-якої фізичної величини, які обчислюються у квантовій механіці за допомогою операторів, будуть дійсними (не комплексними, тобто без уявної частини) величинами тільки при виконанні (5.8). Ця вимога є необхідною, оскільки саме середні та власні значення, які безпосередньо вимірюються в експериментах, завжди є дійсними величинами. Зокрема, ця умова обґрунтовує розглянуту вище необхідність заміни невизначеного порядку розташування величин  $p_x x \leftrightarrow x p_x$  при побудові відповідних операторів на симетризований порядок розташування  $(p_x x + x p_x)/2$ . Це пов'язано з тим, що оператори  $\widehat{p}_x \widehat{x}$  та  $\widehat{x} \widehat{p}_x$  не є самоспряженими, а оператор  $\widehat{p}_x \widehat{x} + \widehat{x} \widehat{p}_x$  є самоспряженим.

Завдяки (5.8) середні значення, які обчислюють за допомогою (5.1), є дійсними величинами, для цього необхідне виконання рівності  $\langle L \rangle = (\langle L \rangle)^*$ . Для доведення даного твердження спочатку запишемо вирази для  $\langle L \rangle$  та  $(\langle L \rangle)^*$ :

$$\langle L \rangle = \int \psi(q)^* \widehat{L}(q) \psi(q) dq, \quad (\langle L \rangle)^* = \int \psi(q) \widehat{L}^*(q) \psi^*(q) dq. \quad (5.9)$$

Із співвідношень (5.9) знаходимо, що необхідна вимога  $\langle L \rangle = (\langle L \rangle)^*$  існує лише за виконання умови самоспряженості (5.8), у якій враховано конкретну заміну  $\psi_n(q) = \psi_m(q) = \psi(q)$ .

## 5.2. Рівняння для визначення власних функцій і власних значень операторів фізичних величин

Співвідношення (5.1) визначає правило обчислення середніх значень тих довільних фізичних величин, які представлені оператором  $\widehat{L}$ . Припустимо, що ми досліджуємо величину  $M$  (їй відповідає оператор  $\widehat{M}$ ) у конкретній фізичній системі. В експериментах важливе

значення мають як середні значення  $\langle M \rangle$  (перший початковий момент) і  $\langle M^2 \rangle$  (другий початковий момент), так і

$$\langle (\Delta M)^2 \rangle = \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$

(другий центральний момент або дисперсія).

Введемо оператор квадрата абсолютної похибки  $(\Delta \hat{M})^2 \equiv (\hat{M} - \langle M \rangle)^2$ .

Якщо покласти в (5.1)  $\hat{L} = (\Delta \hat{M})^2$ , то отримаємо вираз для визначення дисперсії величини  $M$ :

$$\langle (\Delta M)^2 \rangle = \int \psi(q)^* (\Delta \hat{M})^2 \psi(q) dq \quad (5.10)$$

Вводячи на підставі означення оператора (5.2) тимчасову заміну  $\Delta \hat{M} \psi(q) = u(q)$  і використовуючи умову самоспряженості (5.8), поетапно перетворимо (5.10), а саме:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta M)^2 \rangle &= \int \psi(q)^* \Delta \hat{M} u(q) dq = \\ &= \int u(q) \Delta \hat{M}^* \psi(q)^* dq = \int |u(q)|^2 dq = \int |(\hat{M} - \langle M \rangle) \psi(q)|^2 dq \geq 0, \end{aligned} \quad (5.11)$$

що підтверджує невід'ємність дисперсії  $\langle (\Delta M)^2 \rangle$ .

Формули (5.10) і (5.11) дозволяють обчислити дисперсію величини  $M$ , якщо вона вимірюється в експериментах з похибкою. Зауважимо, що йдеться не про "апаратну" похибку, пов'язану з технікою експерименту, а про фундаментальну невизначеність цієї величини, пов'язану, зокрема, зі співвідношенням невизначеностей.

Виникає питання: за якої умови конкретна величина  $M$  набуває строго визначеного значення (або кілька визначених значень) і може бути виміряною без похибок? Очевидно, що такій умові відповідають співвідношення

$$\langle (\Delta M)^2 \rangle = 0, \quad \langle M \rangle = M. \quad (5.12)$$

Виходячи з (5.11), знаходимо, що ці співвідношення еквівалентні рівнянню  $|(\hat{M} - M)\psi(q)| = 0$ . Враховуючи, що модуль комплексної величини дорівнює нулю тільки тоді, коли сама величина дорівнює нулю, остаточно знаходимо умову того, що задана величина  $M$  у даній фізичній системі набуває строго визначеного значення

$$\hat{M}\psi(q) = M\psi(q). \quad (5.13)$$

Якщо таких величин  $M$  може бути кілька або навіть нескінченно багато (але всі вони є фіксованими й набувають строго визначених значень  $M_n$ ), то рівняння (5.13) можна записати в еквівалентній формі

$$\hat{M}\psi_n(q) = M_n\psi_n(q). \quad (5.13, a)$$

Розглянемо зміст отриманого рівняння. Нехай величина  $M$  відповідає повній енергії частинки  $E = T + V$ . У цьому випадку можна використати отриманий вище вираз для оператора повної енергії  $\hat{M} = \hat{H}(q)$  (оператора Гамільтона) (5.7), а рівняння (5.13, a)  $\hat{H}(q)\psi_n(q) = E\psi_n(q)$  набуває вигляду

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(q) \right) \psi_n(q) = E\psi_n(q). \quad (5.14)$$

Ми отримали рівняння (5.14), яке повністю збігається з рівнянням Шредінгера (3.3). Необхідно зазначити, що раніше рівняння Шредінгера було постульоване, а тепер виведене на основі загальних положень квантової механіки. Це рівняння тепер можна вважати рівнянням для визначення власних функцій і власних значень оператора Гамільтона. Аналогічно, повторюючи всі аргументи, наведені при аналізі рівняння Шредінгера (3.3), ми впевнено можемо вважати (5.13, a) загальним рівнянням для визначення власних функцій  $\psi_n(q)$  і власних значень  $M_n$  оператора  $\hat{M}$ . Ці власні функції є:

- скінченними –  $\psi_n(q) < \infty$ ;
- однозначними –  $\psi_n(\varphi) = \psi_n(\varphi \pm 2\pi)$ ;
- неперервними –  $\psi_n(q - \delta) = \psi_n(q + \delta), \delta \rightarrow 0$ ;
- взаємно ортогональними, квадратично інтегрованими та нормованими:  $\int \psi_n^*(q) \psi_m(q) dq = \delta_{nm}$  у випадку дискретного спектра  $M_n$

і  $\int \psi_p^*(q) \psi_{p'}(q) dq = \delta(p - p')$  при неперервному спектрі  $M_p$ .

Вони утворюють повну систему функцій, за якою можна розкласти будь-яку функцію, що задана в тій самій фізичній системі.

Умову взаємної ортогональності легко довести. Для цього спочатку доможимо рівняння (5.13, a) для власних функцій  $\psi_n(q)$  на функцію  $\psi_m^*(q)$ , а аналогічно, але комплексно спряжене рівняння для  $\psi_m^*(q)$ , домножимо на  $\psi_n(q)$ , а потім почленно віднімемо друге рівняння від першого:

$$\psi_m^*(q) \hat{M} \psi_n(q) - \psi_n(q) \hat{M}^* \psi_m^*(q) = (M_n - M_m) \psi_m^*(q) \psi_n(q).$$

Якщо проінтегрувати цю різницю по всій області існування функцій, приходимо до рівності

$$\begin{aligned} \int \psi_m^*(q) \hat{M} \psi_n(q) dq - \int \psi_n(q) \hat{M}^* \psi_m^*(q) dq = \\ = (M_n - M_m) \int \psi_m^*(q) \psi_n(q) dq = 0. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Рівність нулю цього рівняння забезпечується за рахунок того, що лівій частині (5.16) відповідає умова самоспряженості (5.8). Із рівності нулю правої частини (5.16) одразу випливає умова взаємної ортогональності (5.15).

### 5.3. Співвідношення невизначеностей Гейзенберга – Робертсона для довільних фізичних величин

Отримані співвідношення (5.1) і (5.9) дозволяють знаходити середнє значення та дисперсію (тобто перший – початковий і другий – центральний моменти) будь-якої фізичної величини  $L$  у стані, який характеризується хвильовою функцією  $\Psi(q)$ , що не є власною функцією оператора  $\hat{L}$  цієї величини. Ці моменти, згідно з першим постулатом, мають збігатися з результатами прямих експериментальних досліджень. Виникає обгрунтоване питання: як процес вимірювань дисперсії однієї величини ( $M$ ) впливає на вимірювання дисперсію іншої величини ( $L$ )? Причина такого впливу була розглянута вище. Вона полягає в тому, що вимірювання величини  $M$  неконтрольованим чином спотворює хвильову функцію системи  $\Psi(q)$ , що веде до зміни результатів при вимірюванні  $L$ .

За допомогою введеного формалізму операторів фізичних величин вищенаведена задача можна розв'язати в загальному вигляді. Для цього необхідно знайти добуток дисперсій (5.11) двох величин

$$\begin{aligned} \langle (\Delta M)^2 \rangle \langle (\Delta L)^2 \rangle &= \int u^*(q)u(q) dq \int v^*(q)v(q) dq, \\ u(q) &= (\hat{M} - \langle M \rangle) \Psi(q), \quad v(q) = (\hat{L} - \langle L \rangle) \Psi(q). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Зв'язок цього співвідношення з комутатором операторів величин  $L$  і  $M$  встановив у 1929 р. Г. Робертсон. Він використав умову очевидної невід'ємності допоміжного виразу

$$G = \int |\alpha u(q) + i v(q)|^2 dq \geq 0 \quad (5.18)$$

як інтегралу від невід'ємної величини. У цьому виразі  $u(q)$  і  $v(q)$  – довільні функції. Аналізуючи (5.18), Робертсон прийняв, що  $\alpha$  – довільний дійсний параметр.

Якщо розгорнути підінтегральний вираз у (5.18), то отримаємо квадратну нерівність відносно  $\alpha$ :

$$G = \alpha^2 A + \alpha B + C \geq 0, \quad (5.19)$$

де

$$\begin{aligned} A &= \int u^*(q)u(q) dq, \quad B = \{i \int (u^*(q)v(q) - u(q)v^*(q)) dq\}, \\ C &= \int v^*(q)v(q) dq. \end{aligned} \quad (5.20)$$

У нерівності (5.19) можна виділити повний квадрат

$$G = A \left( \alpha + \frac{B}{2A} \right)^2 + \left( C - \frac{B^2}{4A} \right) \geq 0. \quad (5.21)$$

З аналізу (5.20) видно, що  $A \geq 0$ . Величина  $B$  є дійсною, а її квадрат для зручності можна замінити виразом

$$B^2 = |B|^2 = \left| \int (u^*(q)v(q) - u(q)v^*(q)) dq \right|^2. \quad (5.22)$$

Умова невід'ємності (5.21) має виконуватися за будь-яких значень  $\alpha$  (у т. ч. при  $\alpha = -B/2A$ , що відповідає рівності нулю виразу в перших дужках). Для забезпечення цієї вимоги, необхідно, щоб виконувалась умова  $C \geq B^2/4A$ , яка відповідає нерівності

$$\int u^*(q)u(q) dq \int v^*(q)v(q) dq \geq \frac{1}{4} \left| \int (u^*(q)v(q) - u(q)v^*(q)) dq \right|^2. \quad (5.23)$$

Цю нерівність називають *нерівністю Шварца*. Вона справедлива для довільних функцій  $u(q)$  і  $v(q)$ . Ліва частина цієї нерівності дорівнює добутку дисперсій  $\langle (\Delta L)^2 \rangle \langle (\Delta M)^2 \rangle$ . Інтеграл у правій частині нерівності після використання означень  $u(q)$  і  $v(q)$  (5.17) набуває вигляду суми шести інтегралів:

$$\begin{aligned} & \int (u^*(q)v(q) - u(q)v^*(q)) dq = \\ &= \int (\hat{M}^* \Psi^*(q)) \hat{L} \Psi(q) dq - \langle M \rangle \int \Psi^*(q) \hat{L} \Psi(q) dq - \\ & - \langle L \rangle \int \Psi(q) \hat{M}^* \Psi^*(q) dq - \int (\hat{M} \Psi(q)) \hat{L}^* \Psi^*(q) dq + \\ & + \langle M \rangle \int \Psi(q) \hat{L}^* \Psi^*(q) dq + \langle L \rangle \int \Psi^*(q) \hat{M} \Psi(q) dq. \end{aligned} \quad (5.24)$$



Бачимо, що другий і п'ятий та, відповідно, третій і шостий інтеграли в (5.24) попарно задовольняють умову самоспряженості операторів  $\hat{L}$  та  $\hat{M}$  (5.8), а їх різниці унаслідок цього дорівнюють нулю. Використовуючи умову самоспряженості, легко перетворити перший і четвертий інтеграли на симетричний вигляд:

$$\int (\hat{M}^* \Psi^*(q)) (\hat{L} \Psi(q)) dq = \int (\hat{L} \Psi(q)) \hat{M}^* \Psi^*(q) dq = \int \Psi(q) \hat{M} \hat{L} \Psi^*(q) dq,$$

$$\int (\hat{M} \Psi(q)) \hat{L} \Psi^*(q) dq = \int \Psi^*(q) \hat{L} \hat{M} \Psi(q) dq.$$

Враховуючи ці перетворення, приходимо до остаточного вигляду нерівності (5.23)

$$\langle (\Delta L)^2 \rangle \langle (\Delta M)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \left| \int \Psi^*(q) (\hat{L} \hat{M} - \hat{M} \hat{L}) \Psi(q) dq \right|^2. \quad (5.25)$$

Цю нерівність можна перетворити до більш компактної форми

$$\langle (\Delta L)^2 \rangle \langle (\Delta M)^2 \rangle \equiv \sigma_M \sigma_L \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{L} \hat{M}] \rangle|^2, \quad (5.25, a)$$

якщо врахувати, що інтеграл у правій частині (5.25) визначає середнє значення комбінації величин  $LM - ML$ , яка є їх комутатором. Із цих співвідношень, зокрема при  $L = x, M = p_x$ , що відповідає  $[\hat{L} \hat{M}] = [\hat{x} \hat{p}] = i\hbar$ , випливає співвідношення невизначеностей Гейзенберга (2.31)

$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \hbar^2 / 4$ . Ці нерівності називають загальними співвідношеннями невизначеностей, або співвідношеннями невизначеностей Гейзенберга – Робертсона. Звідси випливає, що дві фізичні величини  $L$  і  $M$  можуть мати точно визначені значення тільки тоді, коли їх оператори комутують між собою і  $[\hat{L} \hat{M}] = 0$ .

Умову комутативності операторів можна отримати із рівняння для визначення власних функцій і власних значень (5.13, a). Справді, для того, щоб існував стан, у якому величини  $L$  і  $M$  одночасно мають точно визначені значення, необхідно, щоб у цьому стані для обох величин одночасно виконувалися співвідношення  $\langle (\Delta L)^2 \rangle = 0$  і  $\langle (\Delta M)^2 \rangle = 0$ . Як було показано, такі умови можуть виконуватися лише тоді, коли хвильова функція цього стану  $\Psi_n(q)$  є одночасно власною функцією обох операторів  $\hat{L}$  і  $\hat{M}$ :

$$\begin{aligned} \hat{M} \Psi_n(q) &= M_n \Psi_n(q), \\ \hat{L} \Psi_n(q) &= L_n \Psi_n(q). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Якщо на обидві частини першого з рівнянь (5.26) подіяти оператором  $\hat{L}$ , а на друге рівняння – оператором  $\hat{M}$ , а потім почленно відняти праві та ліві частини отриманих рівнянь, то отримаємо рівняння

$$\hat{M} \hat{L} \Psi_n(q) - \hat{L} \hat{M} \Psi_n(q) \equiv [\hat{L} \hat{M}] \Psi_n(q) \Leftrightarrow (M_n L_n - L_n M_n) \Psi_n(q) \equiv 0,$$

яке визначає передумову  $[\hat{L} \hat{M}] = 0$  того, щоб функція  $\Psi_n(q)$  була власною функцією як  $\hat{L}$ , так і  $\hat{M}$ .

#### 5.4. Співвідношення невизначеностей Шредингера – Робертсона для довільних фізичних величин. Корельовані стани фізичної системи

Отримане вище загальне співвідношення невизначеностей (або співвідношення Гейзенберга – Робертсона) (5.25) і (5.25, a) дозволяє дослідити зв'язок між довільними величинами  $L$  та  $M$  і визначити взаємний вплив при їх вимірюванні. У випадку  $L = x, M = p_x$  воно зводиться до добре відомого співвідношення невизначеностей Гейзенберга  $\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \hbar^2 / 4$  для дисперсій координати та імпульсу й є своєрідним аналогом добре відомих у фізиці коливань співвідношень між розміром локалізації хвильового пакета в координатному просторі та його спектром у просторі хвильових чисел або між тривалістю пакета та його частотним спектром.

Детальний аналіз показує, що можливе додаткове уточнення співвідношення невизначеностей Гейзенберга – Робертсона, яке за певних умов істотно змінює як вигляд цього співвідношення, так і інтерпретацію отриманих з нього результатів. Для цього повторимо розрахунок з п. 5.3, але зробимо його більш загальним. Утворимо добуток дисперсій величин  $L$  і  $M$  (5.17), які обчислюються з використанням операторів дисперсій  $(\Delta \hat{M})^2 = (\hat{M} - \langle M \rangle)^2$  та  $(\Delta \hat{L})^2 = (\hat{L} - \langle L \rangle)^2$ :

$$\langle (\Delta M)^2 \rangle \langle (\Delta L)^2 \rangle = \int u^*(q) u(q) dq \int v^*(q) v(q) dq,$$

$$u(q) = (\hat{M} - \langle M \rangle) \Psi(q), \quad v(q) = (\hat{L} - \langle L \rangle) \Psi(q).$$

Зробимо оцінку цього добутку, використовуючи допоміжний вираз

$$G = \int_{-\infty}^{\infty} |\beta u(q) + i v(q)|^2 dq \geq 0, \quad \beta = \beta' + i\beta''. \quad (5.27)$$

Він відрізняється від (5.18) тим, що довільний параметр  $\beta$  не обмежений дійсними величинами, а є комплексним. Після розгортання підінтегральної функції (запису в явному вигляді квадрата модуля комплексної функції  $\beta u(q) + i v(q)$ ) маємо

$$G = (\beta')^2 \int u^* u dq + i\beta' \int (u^* v - uv^*) dq + (\beta'')^2 \int u^* u dq + \beta'' \int (u^* v + uv^*) dq + \int v^* v dq \geq 0. \quad (5.28)$$

Можна виділити повні квадрати дійсних величин, кожний з яких містить  $\beta'$  і  $\beta''$  (ці квадрати виділені фігурними дужками):

$$G = \left\{ \beta' + \frac{i \int (u^* v - uv^*) dq}{2 \int |u|^2 dq} \right\}^2 \int |u|^2 dq + \left\{ \beta'' + \frac{\int (u^* v + uv^*) dq}{2 \int |u|^2 dq} \right\}^2 \int |u|^2 dq + \int |v|^2 dq - \frac{\{i \int (u^* v - uv^*) dq\}^2}{4 \int |u|^2 dq} - \frac{\{\int (u^* v + uv^*) dq\}^2}{4 \int |u|^2 dq} \geq 0. \quad (5.29)$$

Оскільки вирази  $i \int (u^* v - uv^*) dq$ ,  $\int (u^* v + uv^*) dq$ , які входять у виділені повні квадрати в (5.28) разом з  $\beta'$  і  $\beta''$  дійсні, то ці квадрати є невід'ємними. Мінімальне значення цих квадратів (йому відповідають конкретні величини дійсних параметрів  $\beta'$  і  $\beta''$ ):

$$\beta' = -i \int (u^* v - uv^*) dq / 2 \int |u|^2 dq, \quad \beta'' = - \int (u^* v + uv^*) dq / 2 \int |u|^2 dq$$

дорівнює нулю. Для того, щоб початкова умова  $G \geq 0$  (5.27) виконувалась за будь-яких значень  $\beta'$  і  $\beta''$ , необхідно, щоб різниця трьох останніх дійсних доданків у (5.29) була невід'ємною, що відповідає нерівності

$$\int |u|^2 dq \int |v|^2 dq \geq \frac{1}{4} \{i \int (u^* v - uv^*) dq\}^2 + \frac{1}{4} \{\int (u^* v + uv^*) dq\}^2. \quad (5.30)$$

Це співвідношення називають – *узагальненою нерівністю Шварца*.

Підставимо в (5.30) функції  $u(q) = (\hat{M} - \langle M \rangle) \Psi(q)$  і  $v(q) = (\hat{L} - \langle L \rangle) \Psi(q)$ . Видно, що в цьому випадку вираз у лівій частині (5.30) відповідає добут-

ку дисперсій  $\langle (\Delta L)^2 \rangle \langle (\Delta M)^2 \rangle$ . Перший доданок у правій частині нерівності (5.30) зводиться до виразу

$$(1/4) \left| \int \Psi^*(q) (\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}) \Psi(q) dq \right|^2.$$

Обидва ці вирази були обчислені вище й містяться в (5.23) та (5.24).

Розглянемо вираз, який перебуває під знаком квадрата в другому доданку в правій частині (5.30) і був відсутнім у (5.23) та (5.24). Після підстановки  $u(q)$  і  $v(q)$ , отримуємо:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int (u^* v + uv^*) dq = \frac{1}{2} \left\{ \int (\hat{M}^* \Psi^*) \hat{L} \Psi dq - \langle L \rangle \int (\hat{M}^* \Psi^*) \Psi dq - \right. \\ & - \langle M \rangle \int \Psi^* \hat{L} \Psi dq + \langle M \rangle \langle L \rangle \int \Psi^* \Psi dq + \int (\hat{M} \Psi) \hat{L}^* \Psi^* dq - \\ & - \langle L \rangle \int (\hat{M} \Psi) \Psi^* dq - \langle M \rangle \int \Psi \hat{L}^* \Psi^* dq + \langle M \rangle \langle L \rangle \int \Psi^* \Psi dq \left. \right\} = \\ & = \frac{1}{2} \left\{ \int \Psi^* \hat{M} \hat{L} \Psi dq - \langle L \rangle \langle M \rangle - \langle M \rangle \langle L \rangle + \langle M \rangle \langle L \rangle + \right. \\ & + \int \Psi^* \hat{L} \hat{M} \Psi dq - \langle L \rangle \langle M \rangle - \langle M \rangle \langle L \rangle + \langle M \rangle \langle L \rangle \left. \right\} = \\ & = \frac{1}{2} \int \Psi^* (\hat{M}\hat{L} + \hat{L}\hat{M}) \Psi dq - \langle M \rangle \langle L \rangle = \\ & = \langle \frac{\hat{M}\hat{L} + \hat{L}\hat{M}}{2} \rangle - \langle M \rangle \langle L \rangle \equiv \sigma_{LM}. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Цю величину, аналогічно з класичним виразом для взаємної кореляційної функції для двох випадкових величин  $A$  і  $B$ :

$$\sigma_{AB} = \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle,$$

можна назвати *взаємною дисперсією*  $\sigma_{ML}$  величин  $M$  і  $L$ . Якщо перенести квадрат цього виразу з правої частини (5.30) у ліву і врахувати (5.31), то отримаємо

$$\sigma_M \sigma_L - (\sigma_{ML})^2 = \sigma_M \sigma_L \left( 1 - \left\{ \frac{\sigma_{ML}}{\sqrt{\sigma_M \sigma_L}} \right\}^2 \right) \geq \frac{|\langle \hat{L}\hat{M} \rangle|^2}{4}. \quad (5.32)$$

Нормовану величину

$$r_{ML} = \frac{\sigma_{ML}}{\sqrt{\sigma_M \sigma_L}}, \quad (5.33)$$

яка міститься в (5.32), можна назвати *коефіцієнтом кореляції* операторів  $\hat{L}$  і  $\hat{M}$  у стані, який характеризується хвильовою функцією  $\Psi(q)$ . Можливі значення коефіцієнта кореляції лежать в інтервалі  $-1 \leq r_{ML} \leq 1$ .

Враховуючи (5.33), можна привести (5.32) до вигляду

$$\sigma_M \sigma_L \geq \frac{|\langle [\hat{L}\hat{M}] \rangle|^2}{4(1-r_{ML}^2)}. \quad (5.34)$$

Нерівність (5.34) називають *співвідношенням невизначеностей Шредінгера – Робертсона*. Вона є дуже істотним уточненням співвідношення Гейзенберга – Робертсона.

Для станів фізичної системи, які відповідають повністю некорельованим величинам  $L$  і  $M$ , коли  $\langle \hat{L}\hat{M} \rangle = \langle \hat{L} \rangle \langle \hat{M} \rangle$ , коефіцієнт кореляції дорівнює нулю ( $r_{ML} = 0$ ), а (5.34) зводиться до співвідношення невизначеностей Гейзенберга – Робертсона (5.25) та (2.25, а):

$$\sigma_M \sigma_L \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{L}\hat{M}] \rangle|^2.$$

Наявність часткової кореляції приводить до того, що  $\langle \hat{L}\hat{M} \rangle \neq \langle \hat{L} \rangle \langle \hat{M} \rangle$  і  $0 < r_{ML} < 1$ . Для цього випадку з (5.34) отримуємо

$$\sigma_M \sigma_L > \frac{|\langle [\hat{L}\hat{M}] \rangle|^2}{4}. \quad (5.35)$$

У граничному випадку системи, яка відповідає повній кореляції величин  $L$  і  $M$ , маємо  $r_{ML}^2 \rightarrow 1$ , а співвідношення невизначеностей набуває принципово іншого вигляду

$$\sigma_M \sigma_L \rightarrow \infty. \quad (5.36)$$

Для координати та імпульсу частинки співвідношення невизначеностей Шредінгера – Робертсона (5.35) має вигляд

$$\sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar^2}{4(1-r_{xp_x}^2)}. \quad (5.37)$$

Фізична причина зміни співвідношення невизначеності (5.33) зі зміною коефіцієнта кореляції  $r_{ML}$  полягає в появі зв'язку між взаємною кореляцією різних фізичних величин і тими флуктуаційними збуреннями системи, які відбуваються при вимірюванні однієї величини і впливають на вимірювання іншої. При зростанні ступеня кореляції цей вплив зростає і при  $r_{ML}^2 \rightarrow 1$  стає необмежено значним.

Хвильову функцію корельованих станів можна знайти, виходячи з вимоги  $\langle \hat{L}\hat{M} \rangle \neq \langle \hat{L} \rangle \langle \hat{M} \rangle$ . У конкретній фізичній системі її можна представити як суперпозицію власних функцій  $\Psi_n(q, t)$  цієї системи. Наприклад, у параболічному потенціалі хвильова функція, у якій оператори координати та імпульсу перебувають у корельованому стані з конкретним коефіцієнтом кореляції  $r_{xp_x} \neq 0$ , має вигляд

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_x}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{4\sigma_x} \left( 1 - \frac{ir_{xp_x}}{\sqrt{1-r_{xp_x}^2}} \right) \right\}. \quad (5.38)$$

При  $r_{xp_x} = 0$  ця функція перетворюється на когерентний гауссовий пакет, для якого кореляція повністю відсутня і справедлива умова  $\sigma_x \sigma_{p_x} = \hbar^2 / 4$ , а при  $|r_{xp_x}| \rightarrow 1$  вона відповідає максимально корельованому стану, для якого  $\sigma_x \rightarrow \infty$ ,  $\sigma_{p_x} \rightarrow \infty$ .

Корельовані стани мають велике значення, наприклад, для збільшення прозорості кулонівського потенціального бар'єра у фізиці ядерних реакцій за низької температури.

### Контрольні запитання

1. Для чого необхідний принцип суперпозиції і які наслідки були б за його відсутності?
2. Чи виконується співвідношення невизначеностей Гейзенберга для власних станів?
3. Яке зі співвідношень невизначеностей (Гейзенберга – Робертсона чи Шредінгера – Робертсона) виконується для основного стану гармонічного осцилятора?

**Література:** [1], § 18–25; [2], § 7, 10; [3], § 1, 2.

**Додаткова література:** [II], [V].

## § 6. Нестационарне рівняння Шредінгера та еволюція характеристик квантової системи

### 6.1. Нестационарне рівняння Шредінгера

Проведений вище аналіз специфіки квантового опису явищ мікросвіту не враховував зміни стану системи із часом і стосувався тільки стаціонарних систем (хоча хвильова функція таких систем явно залежала від часу, наприклад, це стосувалося хвиль де Бройля для вільного руху). Нашою метою є отримання, дослідження та використання рівняння еволюції хвильової функції, яке враховує залежність від часу. Побудова такого рівняння буде базуватись як на постулатах квантової механіки, так і на порівнянні достовірних даних експериментів. Наведемо деякі аргументи, які допоможуть це зробити.

Із першого постулату квантової механіки випливає, що вся можлива інформація про стан квантової системи (у т. ч. інформація про зміну хвильової функції системи зі зміною часу) міститься хвильова функція  $\Psi(\vec{r}, t)$ , яка описує цей стан. Іншими словами, знаючи  $\Psi(\vec{r}, t_0)$  у будь-який конкретний момент часу  $t_0$ , можна знайти  $\Psi(\vec{r}, t)$  у довільний момент часу  $t$ . Із цього постулату випливають два важливих висновки:

- з того факту, що для визначення  $\Psi(\vec{r}, t)$  у довільний момент часу  $t$  достатньо знати  $\Psi(\vec{r}, t_0)$  у будь-який конкретний момент часу  $t_0$ , випливає, що рівняння еволюції має містити лише похідну першого порядку за  $t$  (за наявності в рівнянні похідних вищих порядків для його розв'язку необхідно знати не тільки саму функцію  $\Psi(\vec{r}, t_0)$ , але й похідні від неї);

- оскільки вся можлива інформація про зміну функції  $\Psi(\vec{r}, t)$  зі зміною часу (у т. ч. інформація про вигляд і зміну із часом її похідної  $\partial\Psi(\vec{r}, t)/\partial t$ ) міститься в самій функції, то її можна отримати за допомогою дії певного оператора еволюції  $\hat{A}$  на  $\Psi(\vec{r}, t)$ , що в символічному вигляді відповідає рівнянню

$$\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{A}\Psi(\vec{r}, t). \quad (6.1)$$

Вид оператора еволюції  $\hat{A}$  може бути визначений (постульований), якщо знайти його, виходити з вигляду хвильової функції для вільного руху (хвилі де Бройля):

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \exp\{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar\}.$$

Застосовуючи (6.1) до цієї функції, отримуємо

$$\frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi(\vec{r}, t). \quad (6.2)$$

Якщо перейти до операторної форми запису фізичних величин (зокрема, замінити енергію  $E$  оператором Гамільтона  $\hat{H}$ ) і вважати, що це рівняння справедливе не тільки для вільного руху або руху в однорідному полі, але й за наявності неоднорідної та нестационарної потенціальної енергії, для якої  $\hat{H} \equiv \hat{H}(\vec{r}, t)$ , то рівняння (6.2) набуде остаточного вигляду

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t). \quad (6.3)$$

Це рівняння називають *нестационарним рівнянням Шредінгера*.

З урахуванням явного вигляду оператора Гамільтона  $\hat{H}$  (5.7) його можна переписати в розгорнутому вигляді

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t). \quad (6.4)$$

Із формальної точки зору рівняння (6.4) є рівнянням у частинних похідних другого порядку зі змінними коефіцієнтами. Для його розв'язку необхідно задати одну початкову та дві граничні умови для  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Зауважимо, що серед тих, хто тільки починає вивчати квантову механіку, часто складається враження, що квантова механіка – це наука, яка, на відміну від класичної фізики, де всі розв'язки детерміновані, має справу тільки з імовірнісними характеристиками. Це враження хибне. Як доказ можна навести аналіз (6.4).

Отриманий розв'язок (6.4) дозволяє, знаючи початкову та граничні умови, знайти  $\Psi(\vec{r}, t)$  у будь-якій точці простору в довільно віддалений момент часу. Із цього випливає, що  $\Psi(\vec{r}, t)$  є повністю детермінованою функцією, а ймовірнісні характеристики стосуються лише її інтерпретації як амплітуди ймовірності.

Знайдемо розв'язок нестационарного рівняння Шредінгера для стаціонарного випадку, коли оператор Гамільтона  $\hat{H}(\vec{r})$  у рівнянні (6.3)

не залежить від часу. Застосуємо метод розділення змінних. Будемо шукати розв'язок у вигляді функції

$$\Psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r})T(t). \quad (6.5)$$

Підставивши (6.5) у (6.3), а потім розділивши отримане рівняння на (6.5), маємо

$$i\hbar \frac{\partial T(t)}{T(t)} = \frac{\hat{H}(\vec{r})R(\vec{r})}{R(\vec{r})} = \alpha. \quad (6.6)$$

Перша і друга частини рівності (6.6) залежать від різних змінних, тому для її виконання необхідно, щоб обидва вирази дорівнювали сталому параметру  $\alpha$  (параметру розділення). Якщо зіставити ці вирази з параметром  $\alpha$ , то нестационарне рівняння (6.3) поділяється на два диференціальні рівняння. Перше з них має вигляд стаціонарного рівняння Шредінгера (5.14)  $\hat{H}(\vec{r})R(\vec{r}) = \alpha R(\vec{r})$ , у якому функція  $R(\vec{r})$  є однією з власних функцій  $R_n(\vec{r}) \equiv \Psi_n(\vec{r})$  стаціонарного оператора Гамільтона  $\hat{H}(\vec{r})$  і відповідає одному з власних значень  $\alpha \equiv E_n$ . Використовуючи таке значення параметра поділу  $\alpha$ , залежна від часу частина рівняння (6.6) набуває вигляду рівняння першого порядку відносно  $t$ :

$$i\hbar \frac{\partial T(t)}{\partial t} = E_n T(t), \quad (6.7)$$

яке має розв'язок

$$T(t) = \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \quad (6.8)$$

Остаточний розв'язок нестационарного рівняння Шредінгера для стаціонарного випадку, коли система має конкретну енергію  $E_n$ , відповідає хвильовій функції

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \Psi_n(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \quad (6.9)$$

Із (6.9) видно, хвильова функція  $\Psi_n(\vec{r}, t)$ , яка є розв'язком нестационарного рівняння Шредінгера у випадку стаціонарної системи, є узагальненням хвилі де Бройля, яка відповідає вільному руху частинки (у цьому випадку  $\Psi_n(\vec{r}) = A \exp(i\vec{p}_n \vec{r} / \hbar)$ ). Також видно, що хвильова функція конкретного стаціонарного стану є нестационарною й осцилює із частотою, яка відповідає енергії стану.

У загальному випадку, виходячи з принципу суперпозиції, хвильова функція стаціонарної системи має вигляд

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \quad (6.10)$$

Оскільки фізичний зміст має лише інтенсивність хвильової функції  $|\Psi_n(\vec{r}, t)|^2 \equiv |\Psi_n(\vec{r})|^2$ , яка не залежить від часу, то це не приводить до парадоксів. Загальний розв'язок (6.4) залежить від початкової умови  $\Psi(\vec{r}, 0)$ . Виходячи із загального вигляду хвильової функції (6.10), можна запропонувати метод знаходження розв'язку (6.4), який базується на використанні функції Гріна.

Якщо в (6.10) покласти  $t = 0$ , то отримане рівняння

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{r}) \quad (6.11)$$

дозволяє знайти коефіцієнти  $c_n$ . Для цього помножимо (6.10) на функцію  $\Psi_m^*(\vec{r})$  і проінтегруємо отримане рівняння по всій області змінної. Якщо врахувати ортогональність власних функцій  $\Psi_n(\vec{r})$ , то отримаємо

$$c_m = \int \Psi_m^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, 0) dV. \quad (6.12)$$

Підставляючи цей вираз у (6.10), знаходимо

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n \left( \int \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi(\vec{r}', 0) dV' \right) \Psi_n(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \quad (6.13)$$

Якщо ввести функцію Гріна системи, яка описується оператором Гамільтона  $\hat{H}(\vec{r}, t)$  (6.3)

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t) = \sum_n \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi_n(\vec{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right), \quad (6.14)$$

то з (6.13) отримаємо вираз

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int G(\vec{r}, \vec{r}', t) \Psi(\vec{r}', 0) dV', \quad (6.15)$$

який визначає розв'язок рівняння (6.4) на основі довільної початкової умови.

Підставляючи (6.15) у (6.3) маємо: функція Гріна задовольняє нестационарне рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}', t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}, t) G(\vec{r}, \vec{r}', t). \quad (6.16)$$

Якщо покласти в (6.15)  $t = 0$ , то отримаємо співвідношення

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \int G(\vec{r}, \vec{r}', 0) \Psi(\vec{r}', 0) dV', \quad (6.17)$$

аналізуючи яке, видно, що

$$G(\vec{r}, \vec{r}', 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6.18)$$

Рівняння для функції  $G(\vec{r}, \vec{r}', 0)$  випливає з (6.14), якщо покласти  $t = 0$ :

$$G(\vec{r}, \vec{r}', 0) = \sum_n \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi_n(\vec{r}), \quad (6.19)$$

Прирівнюючи (6.17) і (6.18), знаходимо

$$\sum_n \Psi_n^*(\vec{r}') \Psi_n(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (6.20)$$

Ця умова є доказом повноти системи власних функцій.

## 6.2. Рівняння неперервності та закон збереження кількості частинок у квантовій механіці

На основі (6.4) можна отримати деякі корисні співвідношення. Запишемо нестационарне рівняння Шредингера для функції  $\Psi$ , а також аналогічне комплексно спряжене рівняння для  $\Psi^*$ . Перше помножимо на  $\Psi^*$ , а друге – на  $\Psi$  (подіємо лівою та правою частинами відповідного рівняння на  $\Psi^*$  та  $\Psi$ ):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \Psi^* = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \Psi) \Psi^* + V(\vec{r}) \Psi \Psi^* \right),$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \Psi^*) + V(\vec{r}) \Psi^* \right) \Psi.$$

Далі почленно віднімемо друге із цих рівнянь від першого, тоді отримаємо рівняння

$$\left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) + \frac{i\hbar}{2m} \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) = 0. \quad (6.21)$$

При отриманні (6.21) використано рівність

$$(\Psi \Delta \Psi^* - \Psi^* \Delta \Psi) = \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

і враховано, що  $\Psi^* \hat{V}(\vec{r}) \Psi = \Psi \hat{V}(\vec{r}) \Psi^*$ .

Якщо врахувати, що дужка в лівій частині (6.21) відповідає похідній за часом від густини ймовірності  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \equiv \rho$ , і ввести вектор

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi), \quad (6.22)$$

вигляд якого визначається градієнтом функцій  $\Psi^*$  і  $\Psi$ , то рівняння (6.21) набуде вигляду рівняння неперервності

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0, \quad (6.23)$$

яке широко використовується в електродинаміці, гідродинаміці та інших розділах фізики. Зокрема, в електродинаміці це рівняння пов'язує густину розподілу електричного заряду  $\rho_e$  і густину електричного струму (фактично густину потоку розподіленого заряду)  $\vec{j}_e$ . У даному випадку воно пов'язує густину ймовірності локалізації частинки  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \equiv \rho$  з густиною потоку ймовірності  $\vec{j}$  (6.22). Ці дві величини характеризують тільки просторово-нестационарні зміни ймовірнісного закону розподілу частинки (або системи частинок) і не враховують фізичні характеристики, які пов'язані з цими частинками (напр., їх заряд). Якщо, наприклад, частинка має електричний заряд  $q$ , то густина електричного заряду та густина електричного струму, пов'язані з цією частинкою, мають вигляд

$$\rho_e = q\rho(\vec{r}, t) \equiv q |\Psi(\vec{r}, t)|^2,$$

$$\vec{j}_e = q\vec{j}(r, t) \equiv \frac{iq\hbar}{2m} \{ \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) \}. \quad (6.24)$$

Відповідно, якщо нас цікавлять характеристики, пов'язані з перенесенням маси, то густина розподілу маси й густина потоку, який переносить розподілену масу, мають вигляд

$$\rho_m = m\rho(\vec{r}, t) \equiv m |\Psi(\vec{r}, t)|^2,$$

$$\vec{j}_m = m\vec{j}(r, t) \equiv \frac{im\hbar}{2} \{ \Psi(\vec{r}, t) \nabla \Psi^*(\vec{r}, t) - \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla \Psi(\vec{r}, t) \}. \quad (6.25)$$

З означення (6.22) випливає, що  $\vec{j}(\vec{r}, t) = 0$  у випадку, коли  $\Psi(\vec{r}, t)$  є дійсною функцією. Цей результат показує, що під час руху частинки з енергією  $E$ , яка менша від висоти потенціального бар'єра  $V$ , в області бар'єра направленою потоку частинок немає (у цій області хвильова функція є дійсною).



Із рівняння неперервності (6.23) випливає закон збереження повної ймовірності (а в більш широкому розумінні – закон збереження кількості частинок) у нерелятивістській квантовій механіці. Для його доведення проінтегруємо це рівняння за об'ємом  $V$  і врахуємо теорему Гаусса, яка дозволяє замінити інтегрування за об'ємом  $V$  на інтегрування по поверхні  $S$ , яка обмежує цей об'єм з відповідною зміною підінтегральної функції:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\vec{r}, t) dv = - \int_V \nabla \cdot \vec{j} dv = - \oint_S \vec{j} \cdot \vec{n} dS, \quad (6.26)$$

де  $\vec{n}$  – вектор зовнішньої нормалі до поверхні  $S$ .

Якщо розширити об'єм до розмірів всього простору ( $V \rightarrow \infty$ ), то інтегрування в правій частині (6.26) буде проводитись по поверхні, розташованій на нескінченності. Якщо врахувати, що при такому інтегруванні необхідно використовувати величину  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ , яка відповідає нескінченно віддаленій поверхні, і тому дорівнює нулю, через умови  $\Psi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ ,  $\nabla \Psi|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow 0$ , то рівність (6.26) зводиться до співвідношення

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V \rightarrow \infty} \rho(\vec{r}, t) dv \equiv \frac{\partial W(\vec{r} \in V, t)}{\partial t} = 0, \quad (6.27, a)$$

яке доводить закон збереження повної ймовірності розміщення частинки в усьому просторі. Якщо йдеться про систему частинок і  $W(\vec{r} \in V, t) \sim N$ , то з (6.27, a) випливає закон збереження кількості частинок у нерелятивістській квантовій механіці

$$\frac{\partial N}{\partial t} = 0. \quad (6.27, б)$$

### 6.3. Рівняння руху для операторів фізичних величин

У математичному апараті квантової механіки хвильова функція  $\Psi(\vec{r}, t)$  та оператор  $\hat{L}$  є головними об'єктами для розрахунків. Отримане нестационарне рівняння Шредінгера – це рівняння руху хвильової функції, яке дозволяє досліджувати її еволюцію.

Аналогічним чином для дослідження еволюції операторів можна отримати рівняння руху для них. Будемо виходити з третього постулату квантової механіки, який встановлює правило введення опера-

торів конкретних фізичних величин  $L(q, t) \rightarrow \hat{L}(q, t)$ . Середнє значення величини  $L(q, t)$  обчислюється за допомогою співвідношення (5.1):

$$\langle L(t) \rangle = \int \Psi^*(q, t) \hat{L}(q, t) \Psi(q, t) dq.$$

Візьмемо повну похідну від  $\langle L(t) \rangle$  за часом

$$\frac{d \langle L \rangle}{dt} = \int \left\{ \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{L} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi + \Psi^* \hat{L} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\} dx. \quad (6.28)$$

Відповідні похідні від хвильової функції, які містяться в підінтегральному виразі в (6.28), можуть бути замінені виразами

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \Psi^*,$$

які відповідають нестационарному рівнянню Шредінгера. Після такої заміни отримаємо рівняння

$$\frac{d \langle L \rangle}{dt} = \int \Psi^* \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} \Psi dq + \frac{1}{i\hbar} \left\{ \int \Psi^* \hat{L} \hat{H} \Psi dq - \int (\hat{H}^* \Psi^*) \hat{L} \Psi dq \right\}. \quad (6.29)$$

Перетворимо останній інтеграл таким чином, щоб структура підінтегральних виразу в ньому була подібна до аналогічної структури двох перших інтегралів. Для цього спочатку в підінтегральному виразі поміняємо місцями дві функції  $\phi_1 \equiv \hat{H}^* \Psi^* \leftrightarrow \phi_2 \equiv \hat{L} \Psi$ , а потім до перетвореного інтегралу

$$\int \phi_2 \phi_1^* dq \equiv \int (\hat{L} \Psi) \hat{H}^* \Psi^* dq$$

застосуємо умову самоспряженості

$$\int \phi_2 \hat{H}^* \Psi^* dq = \int \Psi^* \hat{H} \phi_2 dq \equiv \int \Psi^* \hat{H} \hat{L} \Psi dq.$$

Після такого перетворення рівняння (6.29) набуває остаточного вигляду

$$\frac{d \langle L \rangle}{dt} = \int \Psi^* \left\{ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} (\hat{L} \hat{H} - \hat{H} \hat{L}) \right\} \Psi dq. \quad (6.30)$$

Це рівняння дозволяє знайти величину  $\frac{d \langle L \rangle}{dt}$ , яка є похідною від середнього значення величини  $L(q, t)$  у даному стані.

З іншого боку, якби нам був відомий оператор  $\frac{d\hat{L}}{dt}$ , то на основі співвідношення (5.1) можна було б знайти середнє значення похідної від тієї самої величини  $L(q,t)$ :

$$\langle \frac{dL}{dt} \rangle = \int \Psi^* \frac{d\hat{L}}{dt} \Psi dq. \quad (6.31)$$

Оскільки в кожному з рівнянь (6.30) і (6.31) операції усереднення за координатою та диференціювання за часом належать до різних незалежних змінних, то можна вважати, що їх можна міняти місцями. Це відповідає умові

$$\langle \frac{dL}{dt} \rangle = \frac{d \langle L \rangle}{dt}. \quad (6.32)$$

Із рівності лівих частин (6.31) і (6.32) випливає співвідношення

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}], \quad (6.33)$$

яке є рівнянням руху для оператора  $\hat{L}(q,t)$ .

## 6.4. Теорема Еренфеста.

### Квантові рівняння Ньютона

Отримаємо рівняння руху для найбільш простих операторів –  $\hat{x}$  і  $\hat{p}_x$ . Ці оператори не містять у явному вигляді час, для них  $\frac{\partial \hat{x}}{\partial t} = 0$  і  $\frac{\partial \hat{p}_x}{\partial t} = 0$ , а рівняння руху мають загальний вигляд

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}\hat{H}], \quad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_x\hat{H}]. \quad (6.34)$$

Виходячи з явного вигляду операторів  $\hat{x} = x$  і  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , а також вигляду оператора Гамільтона  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x)$ , легко знайти відповідні комутатори

$$[\hat{x}\hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{p}_x\hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}, \quad (6.35)$$

а також отримати рівняння руху для оператора координати

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \equiv \frac{\hat{p}_x}{m}, \quad \frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}_x \quad (6.36)$$

та імпульсу

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = \hat{F}_x. \quad (6.37)$$

У (6.26) введений оператор швидкості  $\frac{d\hat{x}}{dt} = \hat{v}_x$ , а в (6.37) – оператор

сили  $\hat{F}_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$ , які є повними аналогами відповідних виразів для швидкості та сили в класичній фізиці.

Рівняння (6.36) і (6.37) за своєю структурою є повним аналогом рівнянь Гамільтона з класичної механіки. Їх називають *теоремою Еренфеста* і на їх основі встановлюють правило побудови квантових рівнянь руху методом заміни відповідних класичних виразів їх операторними аналогами. Якщо провести усереднення цих рівнянь, то отримаємо рівняння для середньої швидкості

$$\langle v_x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \quad (6.36, a)$$

та імпульсу

$$\frac{d \langle p_x \rangle}{dt} = \langle F_x \rangle, \quad (6.37, a)$$

які збігаються з відповідними класичними рівняннями.

Отримані результати та явний вигляд рівнянь (6.35), (6.36) і (6.35, a), (6.36, a) дають наочну відповідь на запитання, які виникають при вивченні квантової механіки:

- які з рівнянь є більш загальними – рівняння Шредінгера з квантової механіки чи рівняння Ньютона (другий закон Ньютона), або рівноцінні рівняння Гамільтона з класичної механіки?
- чи можна з рівняння Шредінгера отримати рівняння Ньютона? Відповідь очевидна – із рівнянь квантової механіки безпосередньо отримують рівняння класичної механіки, зокрема, із рівняння Шредінгера можна отримати рівняння Ньютона та Гамільтона.

## 6.5. Інтеграл руху у квантовій механіці

*Інтегралами руху* у квантовій механіці (як і в класичній фізиці) називаються величини, які не змінюються із часом. Конкретна величина  $L$  буде інтегралом руху, якщо відповідний їй оператор  $\hat{L}$  задовольняє рівняння

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}] = 0. \quad (6.38)$$

Якщо оператор  $\hat{L}$  явно не залежить від часу і  $\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = 0$ , то відповідна величина  $L$  буде інтегралом руху, коли її оператор комутує з оператором Гамільтона.

Виходячи з процедури визначення середніх величин (5.1) і беручи до уваги рівність (6.32), знаходимо, що альтернативою до означення інтегралу руху (6.38) є умова

$$\frac{d \langle L \rangle}{dt} = 0. \quad (6.39)$$

Відповідь на питання про те, які конкретні величини, що характеризують стан частинки, є інтегралами руху, залежить від виду силового поля (потенціальної енергії  $V$ ), у якому перебуває частинка.

Розглянемо два найбільш важливих приклади силового поля:

а) *інтеграл руху в однорідному полі*  $V = V_0 = \text{const}$ . Легко впевнитись, що в однорідному полі оператор імпульсу  $\hat{p}$  комутує з оператором Гамільтона  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0$ , тобто є інтегралом руху. Цей результат одразу випливає з вигляду відповідного комутатора  $[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \hat{p}^2/2m] + [\hat{p}, V_0]$  і тієї обставини, що оператор імпульсу  $\hat{p}$  комутує як з  $\hat{p}^n$ , так і зі сталою величиною  $V_0$ .

Оскільки оператор Гамільтона завжди комутує сам із собою, то іншим інтегралом руху є енергія. Зазвичай для цього необхідно, щоб оператор Гамільтона явно не залежав від часу, що відповідає консервативній системі. Інших інтегралів руху в однорідному полі немає.

Важливо зазначити, що поява інтегралів руху відображає певну симетрію системи. Зокрема, незалежність енергії системи від часу відображає симетрію відносно довільного зсуву за часом. Відсутність такої симетрії може призводити до явної залежності від часу, і тому

до результату  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \neq 0$ , який веде до порушення основної умови (6.38) і до того, що енергія не буде інтегралом руху. Такий результат буде, наприклад, у неконсервативних системах.

Подібна обставина стосується також закону збереження імпульсу, який випливає з однорідності простору. Цей результат легко підтвердити, якщо ввести оператор трансляції  $\hat{A}_R$ , що визначається рівнянням

$$\hat{A}_R \Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{R}). \quad (6.40)$$

Явний вигляд цього оператора легко знайти, якщо розкласти функцію  $\Psi(\vec{r} + \vec{R})$  у ряд Тейлора в околі точки  $\vec{r}$ :

$$\Psi(\vec{r} + \vec{R}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\vec{R}\nabla)^n}{n!} \Psi(\vec{r}) = e^{\vec{R}\nabla} \Psi(\vec{r}), \quad (6.41)$$

а потім згорнути отриманий ряд операторів у вигляді експоненти з показником  $\vec{R}\nabla = \frac{i}{\hbar} \vec{R}\hat{p}$ . З отриманого розрахунку випливає, що оператор трансляції має вигляд

$$\hat{A}_R = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{R}\hat{p}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\vec{R}/\hbar)^n}{n!} \hat{p}^n. \quad (6.42)$$

Для того, щоб зсув системи на довільний вектор  $\vec{R}$  не змінював енергію системи, необхідно, щоб оператор трансляції (6.42) комутував з оператором Гамільтона, а це можливо лише тоді, коли оператор  $\hat{p}^n$  комутує з  $\hat{H}$  і  $[\hat{p}^n \hat{H}] = 0$ . Із цієї умови випливає закон збереження імпульсу;

б) *інтеграл руху в полі центральної сили*  $V(r)$ . В атомній фізиці велике значення має сферично-симетрична взаємодія, яка описується потенціальною енергією  $V(r)$  і залежить тільки від абсолютного значення вектора  $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ , що з'єднує дві точки силового поля й не залежить від просторової орієнтації цього вектора у вибраній системі координат. Це є *полем центральної сили*, або *центральною силою*. Такому полю найбільш адекватно відповідає сферична система координат (рис. 6.1).

Перехід між декартовою  $\vec{r} = \{x, y, z\}$  і сферичною  $\vec{r} = \{r, \theta, \phi\}$  системами координат відповідає замінам змінних:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi, \\ y &= r \sin \theta \sin \phi, \\ z &= r \cos \theta. \end{aligned} \quad (6.43)$$

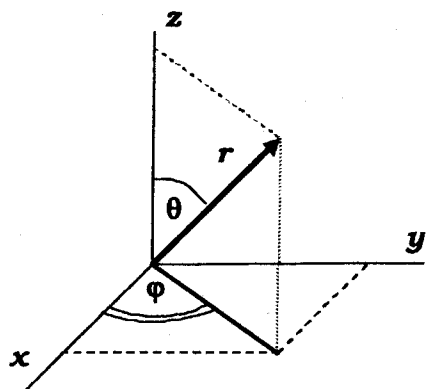


Рис. 6.1. Сферична система координат

Отримаємо оператори деяких фізичних величин, які є найбільш адаптованими до розгляду задач у сферичній системі координат. Як відомо з класичної механіки, вектор моменту імпульсу  $\vec{L} = [\vec{r} \vec{p}]$  відіграє важливу роль у задачах про рух у полі центральної сили. Введемо оператор  $\hat{L} = [\hat{r} \hat{p}]$ , який у декартовій і сферичній системах має три компоненти:

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = i\hbar(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}) = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \text{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = i\hbar(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}) = -i\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \text{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = i\hbar(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \end{aligned} \quad (6.44)$$

Прямою підстановкою (6.44) (із використанням виразів у декартовій системі та з урахуванням комутатора  $[q\hat{p}_q] = i\hbar$ ) переконуємось, що комутатори різних компонент оператора  $\hat{L}$  описуються співвідношеннями

$$[\hat{L}_x\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y\hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \quad (6.45)$$

Звідси випливає, що немає такої фізичної системи, де різні компоненти моменту імпульсу набувають точно визначених значень, тобто можуть бути виміряні без похибок.

Аналогічно можна ввести оператор квадрата моменту імпульсу  $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ , який у сферичній системі координат має вигляд

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\}. \quad (6.46)$$

Використовуючи (6.45) легко переконатись, що оператор  $\hat{L}^2$  комутує з усіма компонентами моменту імпульсу  $\hat{L}_i$ :

$$[\hat{L}_i\hat{L}^2] = 0. \quad (6.47)$$

Оператор кінетичної енергії при переході до сферичної системи координат набуває вигляду

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (6.48)$$

Порівняння (6.46) і (6.48) показує, що кутова частина оператора  $\hat{T}$  пропорційна оператору  $\hat{L}^2$ , що дозволяє записати (6.48) у компактному вигляді

$$\hat{T} = \hat{T}_r(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2}, \quad \hat{T}_r(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right). \quad (6.49)$$

У цьому виразі оператор  $\hat{T}_r(r)$  відповідає радіальній частині оператора Гамільтона. Відповідним чином можна записати оператор Гамільтона

$$\hat{H} = \hat{T}_r(r) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r). \quad (6.50)$$

Використовуючи отримані вирази, з'ясуємо, які з розглянутих величин є інтегралами руху в полі центральної сили. Враховуючи те, що оператори всіх компонент моменту імпульсу  $\hat{L}_i$  (6.44) у сферичній системі залежать тільки від кутових змінних, і тому комутують з  $\hat{T}_r(r)$ , а також, беручи до уваги співвідношення (6.47), очевидно, що будь-яка з компонент моменту імпульсу  $\hat{L}_i$  комутує з трьома складовими оператора Гамільтона (6.50):

$$[\hat{L}_i\hat{H}] = 0. \quad (6.51)$$

Згідно з умовою (6.36) усі компоненти моменту імпульсу  $\hat{L}_i$  є інтегралами руху в полі центральної сили. Інтегралом руху є також квадрат

моменту імпульсу, оскільки оператор  $\hat{L}^2$  також комутує з трьома складовими оператора Гамільтона (6.50).

Третім інтегралом руху, як у будь-якій консервативній системі, є енергія. Зазначимо про одну дуже важливу обставину. Зі співвідношення  $[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$  (6.51) випливає, що всі три компоненти  $\hat{L}_i$  є інтегралами руху. Водночас із системи співвідношень (6.35) можна зробити висновок, що немає системи, де різні компоненти  $L_x, L_y$  і  $L_z$  можуть одночасно мати точно визначені значення. Ці співвідношення узгоджуються тільки для однієї компоненти  $L_i$ . Далі все залежить від того, до якої з компонент адаптована конкретна задача. Якщо це компонента  $L_i$ , то  $L_j$  і  $L_k$  ( $i \neq j \neq k$ ) будуть невизначеними.

Надалі для зручності, виходячи з того, що оператор  $\hat{L}_z$  (6.44) має найбільш простий вигляд, прийемо, що строго визначеною компонентою моменту імпульсу та інтегралом руху є  $L_z$ . Це відповідає умові, що вісь  $oz$  буде віссю квантування. Увесь подальший аналіз буде адаптований до цієї умови.

#### Контрольні запитання

1. Чи можна виміряти частоту коливань хвильової функції у власному та суперпозиційному станах?
2. Як зміниться хвильова функція частинки в одномірній періодичній системі при її зсуві на  $n$  кроків вправо або вліво?
3. Які величини є інтегралами руху в системі, яка містить однорідне силове поле і сферично-симетричний потенціал?

**Література:** [1], § 28–30; [2], § 14–17.

## Розділ III

### РУХ ЧАСТИНОК У ПОЛІ ЦЕНТРАЛЬНОЇ СИЛИ

#### § 7. Рух частинки в полі центральної сили. Рівняння Шредінгера та радіальний рух електрона в атомі

##### 7.1. Загальний розв'язок рівняння Шредінгера для кутової частини хвильової функції в полі центральної сили

Аналіз руху частинок у полі центральної сили був однією з причин, яка обумовила створення квантової механіки. Стан будь-якої системи можна класифікувати, базуючись на величинах інтегралів руху. Для цього насамперед необхідно знайти всі розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}(r, \theta, \varphi)\Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi), \quad \hat{H}(r, \theta, \varphi) = \hat{T}_r(r) + \frac{\hat{L}^2(\theta, \varphi)}{2mr^2} + V(r), \quad (7.1)$$

що визначає спектр рівнів енергії, яка є інтегралом руху. Оскільки (7.1) є рівнянням у частинних похідних другого порядку зі змінними коефіцієнтами, то в загальному випадку його розв'язок є надзвичайно складною задачею.

Іншими інтегралами руху є момент імпульсу, квадрат якого визначається з рівняння

$$\hat{L}^2(\theta, \varphi)Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi), \quad (7.2)$$

і проекція цього моменту  $L_z$ , величина якого визначається з рівняння

$$\hat{L}_z(\varphi)\Phi(\varphi) \equiv -i\hbar \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} = L_z \Phi(\varphi). \quad (7.3)$$

Оскільки оператор Гамільтона  $\hat{H}(r, \theta, \varphi)$  комутує з операторами  $\hat{L}^2(\theta, \varphi)$  і  $\hat{L}_z(\varphi)$ , то вони мають спільну систему власних функцій (звичай щодо спільних змінних). Така умова може виконуватися тільки тоді, коли більш складна функція від  $N$  змінних містить більш просту функцію від  $N - 1$  змінної у вигляді співмножника

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi), \quad Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (7.4)$$

Виходячи з цього, очевидно, що розв'язки системи рівнянь (7.1) – (7.3) слід знаходити шляхом поетапного аналізу цих рівнянь, починаючи з найбільш простого рівняння (7.3). Після його розв'язання отриману функцію  $\Phi(\varphi)$  слід використати для визначення функції  $\Theta(\theta)$  із (7.2). Нарешті, використовуючи отриманий при цьому вираз для  $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ , можна перетворити рівняння в частинних похідних (7.1) на звичайне рівняння з радіальною змінною для визначення радіальної частини функції  $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$ , яка відповідає конкретному виду центрального поля  $V(r)$ .

Розв'язок рівняння (7.3), який задовольняє умову однозначності  $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi \pm 2\pi)$  і є нормованим на інтервалі  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , має вигляд

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}; \quad L_z = m\hbar, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7.5)$$

Цей розв'язок є власною функцією оператора  $\hat{L}_z$  і відповідає власному значенню  $L_z$  (7.5), яке визначає можливі значення проекції моменту імпульсу на вісь  $z$ . Його величина залежить від магнітного квантового числа  $m$ . Після підстановки функції  $Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)e^{im\varphi}$  у (7.2), воно перетворюється на рівняння

$$\left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right\} \Theta(\theta) = \lambda \Theta(\theta), \quad \lambda = \frac{L^2}{\hbar^2}. \quad (7.6)$$

Функцію  $\Theta(\theta)$  шукатимемо у вигляді нескінченного ряду

$$\Theta(\theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{v=0}^{\infty} b_v \cos^v \theta. \quad (7.7)$$

Після підстановки цього ряду в (7.7) отримаємо рівняння

$$\sum_{v=0}^{\infty} c_v \cos^v \theta = 0, \quad c_v \equiv \{b_{v+2}(v+2)(v+1) - b_v((v+1)v - \lambda)\}, \quad (7.8)$$

яке може задовольнятися для всіх кутів  $0 \leq \theta \leq \pi$  тільки за умови  $c_v = 0$ . Із цієї умови знаходимо рекурентне співвідношення для коефіцієнтів послідовних членів ряду (7.7):

$$b_{v+2} = b_v \frac{(v+1)v - \lambda}{(v+2)(v+1)}. \quad (7.9)$$

Співвідношення (7.7) і (7.9) відповідають формальному розв'язку рівняння (7.6) – за допомогою (7.9) усі коефіцієнти  $b_v$  можна виразити через  $b_0$  (для парної функції  $\Theta(\theta) = \Theta(-\theta)$ ) або через  $b_1$  (для непарної функції  $\Theta(\theta) = -\Theta(-\theta)$ ), а  $b_0$  та  $b_1$  можна знайти з умови нормування. Для того, щоб функція  $\Theta(\theta)$  була власною, необхідно, щоб вона задовольняла відповідні умови. Для перевірки скінченності розв'язку (7.7) розглянемо асимптотичну поведінку коефіцієнтів  $b_v$  при  $v \gg 1$ . Із (7.9) отримуємо

$$b_{v+2}/b_v \big|_{v \gg 1} \rightarrow 1. \quad (7.10)$$

Із (7.7) випливає, що ряд, у якому виконується умова (7.10), при певних кутах може розходитись (зокрема, це відбувається при  $m = 0$ ,  $\theta = 0$ ). Вимога скінченності (7.7) може бути виконаною, якщо параметр  $\lambda$  у формулі (7.9) має вигляд виразу  $\lambda = l(l+1)$ , у якому  $l = 1, 2, 3, \dots$ . За такої умови нескінченний ряд (7.7) обривається й перетворюється на багаточлен з максимальним степенем  $v_{\max} = l$ . Ця умова відповідає власним значенням

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (7.11)$$

оператора  $\hat{L}^2$  у рівнянні (7.2), величина яких визначається орбітальними квантовими числами  $l$ .

Хвильова функція

$$\Theta(\theta) = (1 - \cos^2 \theta)^{\frac{|m|}{2}} \sum_{v=0}^l b_v \cos^v \theta \equiv P_l^m(\cos \theta), \quad (7.12)$$

яка відповідає власним значенням  $\lambda = l(l+1)$  рівняння (7.6), добре відома в математичній фізиці спеціальною функцією – *приєднаним поліномом Лежандра*.

Після нормування в межах всього тілесного кута

$$\int_{4\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

отримуємо остаточний вигляд для хвильової функції

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}}, \quad (7.13)$$

яка є власною функцією оператора  $\hat{L}^2$  і відповідає власним значенням (7.11) і водночас є кутовою частиною власної функції  $\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$  оператора Гамільтона в полі центральної сили  $V(r)$  у рівнянні Шредінгера (7.1). Цю функцію називають *сферичною функцією, або сферичною гармонікою*.

З умови невід'ємності факторіала  $(l-|m|)!$  у підкореневому виразі в (7.13) отримуємо співвідношення між орбітальним і магнітним квантовими числами

$$|m| \leq l: m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l. \quad (7.14)$$

Наведемо явний вигляд кількох сферичних функцій

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \quad (7.15)$$

$$Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta),$$

$$Y_{2\pm 1}(\theta, \varphi) = \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cos \theta \sin \theta e^{\pm 2i\varphi}, \quad Y_{2\pm 2}(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi},$$

які відповідають найменшим квантовим числам.

Відповідно до (7.11) абсолютна величина вектора моменту імпульсу частинки в центральному полі має значення  $L = \sqrt{l(l+1)}\hbar, l = 0, 1, 2, \dots$

Ці значення перевищують абсолютну величину проекції вектора моменту імпульсу  $L_z = m\hbar, m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ . Така умова означає, що вектор  $\vec{L}$  може мати лише певні дискретні орієнтації відносно осі  $z$ . Це явище називають *просторовим квантуванням*. Приклад просторового квантування моменту імпульсу для стану з  $l=2$  представлено на рис. 7.2. Для цього стану можливі такі значення моменту імпульсу та його проекцій:  $|\vec{L}| = \sqrt{6}\hbar, L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$ .

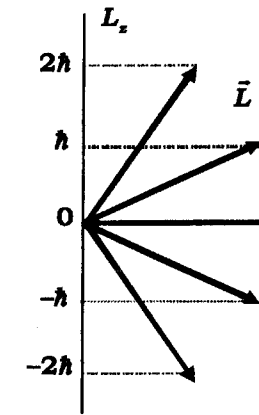


Рис. 7.2. Просторове квантування моменту імпульсу для стану з  $l = 2$

## 7.2. Рух електрона в кулонівському полі ядра

Перейдемо до розв'язання рівняння (7.1), розглядаючи рух електрона в полі ядра  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  із зарядом  $Ze$ . Масу електрона будемо позначати  $\mu$ . Це дозволить уникнути непорозуміння, пов'язаних зі збігом позначення літерою  $m$  для маси частинки та магнітного квантового числа.

Спочатку зробимо заміну хвильової функції

$$R(r) = \frac{U(r)}{r} \quad (7.16)$$

і врахуємо (7.2) і (7.11). Рівняння (7.1) набуває вигляду

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} U + V(r)U = EU. \quad (7.17)$$



У цьому рівнянні величина

$$V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2} = \tilde{V}(r)$$

є ефективною потенціальною енергією, яка враховує наявність відцентрового потенціального бар'єра  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}$ , наявність якого частково компенсує кулонівське притягування електрона до ядра.

Рівняння (7.17) можна додатково спростити, ввівши безрозмірну координату

$$\rho = \frac{r}{a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}. \quad (7.18)$$

Після цього отримаємо рівняння

$$\frac{d^2 U}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} U + \frac{2Z}{\rho} U = -\varepsilon U, \quad \varepsilon = \frac{E}{(e^2/2a)} \equiv \frac{2\hbar^2 E a}{\mu e^4}. \quad (7.19)$$

Нам необхідно знайти всі скінченні, неперервні та нормовані розв'язки цього рівняння в області  $0 \leq \rho < \infty$ . Спочатку знайдемо асимптотичні розв'язки. При  $\rho \rightarrow \infty$  рівняння набуває асимптотичного вигляду

$$\frac{d^2 U_\infty}{d\rho^2} + \varepsilon U_\infty = 0 \quad (7.20)$$

і має загальний розв'язок

$$U_\infty = C_1 e^{i\sqrt{\varepsilon}\rho} + C_2 e^{-i\sqrt{\varepsilon}\rho}. \quad (7.21)$$

У випадку  $\varepsilon > 0$  цей розв'язок (з урахуванням (7.16)) є лінійною суперпозицією двох частинних розв'язків, які відповідають збіжним і розбіжним хвилям, що описують стани частинки, яка рухається з нескінченності до центра поля, і навпаки. Із погляду класичної механіки такі частинки рухаються по аперіодичних орбітах і не утворюють зв'язаних станів. Така задача характеризує вільний рух і не відповідає зв'язаній системі електрона та ядра.

При  $\varepsilon < 0$  розв'язок (7.21)

$$U_\infty = C_1 e^{-\sqrt{|\varepsilon|\rho}}, \quad (7.22)$$

у якому враховано умову скінченності хвильової функції, відповідає випадку, коли ймовірність локалізації електрона дуже швидко спадає при збільшенні відстані від ядра. Така система характеризує зв'язаний стан,

що відповідає атому. Другий розв'язок ( $U_\infty = C_2 e^{\sqrt{|\varepsilon|\rho}$ ) треба відкинути, поклавши  $C_2 = 0$ , оскільки він визначає необмежено зростаючу функцію, що суперечить умові, якій має відповідати власна функція.

Знайдемо розв'язок для області  $\rho \rightarrow 0$ . Для цієї області рівняння (7.19) має вигляд

$$\frac{d^2 U_0}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} U_0 = 0 \quad (7.23)$$

і характеризується загальним розв'язком  $U_0 = B_1 \rho^{l+1} + B_2 \rho^{-l}$ . Умову скінченності цієї функції при  $\rho \rightarrow 0$  можна забезпечити, якщо покласти  $B_2 = 0$ . Таким чином, поведінка хвильової функції електрона в околі ядра описується виразом

$$U_0 = B_1 \rho^{l+1}. \quad (7.24)$$

Якщо врахувати цей результат, то видно, що повна хвильова функція електрона (7.16) в околі ядра буде характеризуватись функцією  $R_0(\rho) \sim \rho^l$ . Цей результат показує, що у стані з орбітальним квантовим числом  $l = 0$  електрон може перебувати в околі ядра, і навіть усередині ядра (при  $\rho \rightarrow 0$  імовірність локалізації відмінна від нуля). В інших станах з  $l > 0$  таке неможливо.

Перейдемо до пошуку загального розв'язку рівняння (7.19). Будемо шукати його у вигляді функції

$$U(\rho) = U_\infty(\rho) U_0(\rho) f(\rho) = e^{-\sqrt{|\varepsilon|\rho}} \rho^{l+1} f(\rho). \quad (7.25)$$

Підставляючи (7.25) у (7.19), отримуємо рівняння

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + 2(l+1 - \sqrt{|\varepsilon|\rho}) \frac{df}{d\rho} + 2[Z - \sqrt{|\varepsilon|\rho}(l+1)] f = 0. \quad (7.26)$$

Шукаємо його розв'язок у вигляді степеневого ряду

$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k. \quad (7.27)$$

Після підстановки (7.27) у (7.26), отримаємо рівняння

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-1} + 2(l+1) \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^{k-1} - 2\sqrt{|\varepsilon|\rho} \sum_{k=0}^{\infty} k a_k \rho^k + 2[Z - \sqrt{|\varepsilon|\rho}(l+1)] \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k = 0. \quad (7.28)$$

У перших двох сумах у (7.28) член, який відповідає  $k=0$ , дорівнює нулю, і тому ці суми починаються з  $k=1$ . Враховуючи цю обставину, можна зробити заміну індексу підсумовування  $k \rightarrow k+1$ , після чого (7.28) перетвориться на більш зручний вигляд

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k \rho^k = 0, \quad c_k \equiv \left\{ a_{k+1} [k(k+1) + 2(k+1)(l+1)] - a_k 2 \left[ \sqrt{|\varepsilon|} (l+k+1) - Z \right] \right\}. \quad (7.29)$$

Це рівняння має виконуватися при всіх значеннях  $0 \leq \rho < \infty$ , що може бути лише за виконання умови  $c_k = 0$ , яка приводить до рекурентного співвідношення між коефіцієнтами ряду

$$a_{k+1} = a_k \frac{2\sqrt{|\varepsilon|} [k+l+1 - (Z/\sqrt{|\varepsilon|})]}{k(k+1) + 2(k+1)(l+1)}. \quad (7.30)$$

За допомогою цього співвідношення можна визначити всі коефіцієнти ряду (7.27), виразивши їх через коефіцієнт  $a_0$ , який можна знайти з умови нормування. Формально співвідношення (7.30) разом з виразами (7.25) – (7.27) визначає розв'язок рівняння (7.17). Для того, щоб цей розв'язок був власною функцією, необхідне виконання умов (5.15).

Простий аналіз показує, що ряд (7.27) з використанням рекурентного співвідношення (7.30) приводить до необмежено зростаючої хвильової функції. У цьому легко переконатись, якщо розглянути найбільш істотні (щодо забезпечення скінченності ряду при збільшенні координати) члени ряду (7.27) з великими номерами  $k \rightarrow \infty$ , для яких

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{2\sqrt{|\varepsilon|}}{k}. \quad (7.31)$$

Прямий розклад функції

$$e^{2\sqrt{|\varepsilon|}\rho} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\sqrt{|\varepsilon|})^k}{k!} \rho^k \quad (7.32)$$

у ряд Тейлора показує, що при  $k \rightarrow \infty$  існує таке саме рекурентне співвідношення між послідовними коефіцієнтами цього розкладу, як у (7.31), і отже, при  $\rho \rightarrow \infty$  функція (7.27) зводиться до (7.32):

$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^k \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow e^{2\sqrt{|\varepsilon|}\rho} \Big|_{\rho \rightarrow \infty}.$$

Якщо врахувати загальний вигляд розв'язку (7.25), маємо

$$U(\rho) \rightarrow e^{\sqrt{|\varepsilon|}\rho} \rho^{l+1} \Big|_{\rho \rightarrow \infty} \rightarrow \infty. \quad (7.33)$$

Цей результат точно повторює асимптотичний розв'язок  $U_{\infty} \sim e^{\sqrt{|\varepsilon|}\rho}$ , який був отриманий вище (в (7.21)) і відкинутий відповідним вибором коефіцієнта. Зараз такої можливості "ручної" корекції немає.

Єдина можливість забезпечити скінченність розв'язку пов'язана з умовою перетворення нескінченного ряду (7.27) на скінченний багаточлен. Це може бути здійснено за умови, коли комбінація параметрів  $Z/\sqrt{|\varepsilon|}$  у чисельнику формули (7.30) є цілим натуральним числом

$$\frac{Z}{\sqrt{|\varepsilon|}} = n, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (7.34)$$

яке може набувати тих самих значень, що й комбінація  $k+l+1$  у тому самому чисельнику. У цьому випадку при  $k+l+1=n$  ряд обривається на номері  $k_{\max} = n-l-1$ . Така умова забезпечує скінченність власної функції (7.25) за рахунок наявності в (7.25) функції  $U(\rho) \sim e^{-\sqrt{|\varepsilon|}\rho}$ , яка при  $\rho \rightarrow \infty$  спадає значно швидше, ніж зростає будь-який скінченний поліном.

Поліном

$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{n-l-1} a_k \rho^k \equiv L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \quad (7.35)$$

коефіцієнти якого відповідають рекурентному співвідношенню (7.30), є розв'язком рівняння (7.26) і має назву *узагальнений, або приєднаний, поліном Лагерра*  $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ .

З умови (7.34) знаходимо спектр можливих значень (рівнів) енергії електрона в полі ядра

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \equiv -\frac{Z^2 Ry}{n^2}, \quad Ry = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \approx 13,6 \text{ еВ}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.36)$$

Енергія електрона залежить тільки від головного квантового числа  $n$ . Найнижчий рівень енергії відповідає головному квантовому числу  $n=1$ . Величина  $Ry \approx 13,6$  еВ визначає енергію основного стану атома водню й має назву *стала Рідберга*. Між рівнями енергії можливі переходи, які супроводжуються поглинанням або виділенням енергії. Як правило, найімовірнішими є переходи, при яких поглинаються або випромінюються кванти електромагнітного випромінювання (фотони). Частота цих фотонів відповідає величині

$$\omega_{kn} = \frac{|E_k - E_n|}{\hbar} = \frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^3} \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right| \equiv \frac{Z^2 Ry}{\hbar} \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right|. \quad (7.37)$$

Спектр цих рівнів і приклади можливих переходів між ними наведено на рис. 7.3. Цим власним значенням відповідають функції  $R(r) = U(r)/r$  (7.16), які після переходу у виразі (7.25) для  $U(\rho)$  до радіальної координати  $r$  і нормування

$$\int_0^\infty |R_{nl}(r)|^2 r^2 dr = 1$$

набувають остаточного вигляду

$$R_{nl}(r) = -\sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4 a^3 \{(n+1)!\}^3}} \left(\frac{2Z}{na} r\right)^l \exp\left(-\frac{Zr}{na}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na}\right). \quad (7.38)$$

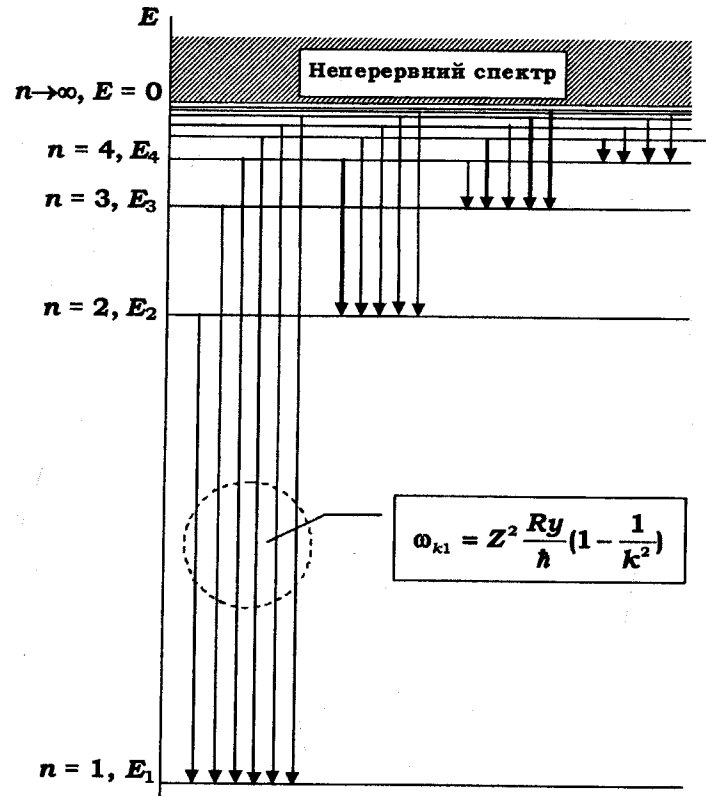


Рис. 7.3. Спектр рівнів енергії електрона в полі ядра

Загальна хвильова функція, яка описує просторовий стан електрона в полі ядра із зарядом  $Ze$ , має вигляд

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (7.39)$$

Враховуючи умову  $k+l+1 = n$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , яка була використана при отриманні (7.34), знаходимо, що максимальне значення орбітального квантового числа  $l = 0, 1, 2, \dots$  (7.11) обмежене рівністю  $l_{\max} = n - 1 - k_{\min} = n - 1$ . Таким чином, інтервал можливих значень орбітального  $l$  і магнітного  $m$  (7.14) квантових чисел відповідає умовам

$$l = 0, 1, 2, \dots, n - 1, \quad m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l. \quad (7.40)$$

Враховуючи, що енергія станів  $E_n$  залежить тільки від головного квантового числа  $n$ , знаходимо, що стани, які описуються хвильовою функцією  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$  (7.38), є виродженими. Кратність виродження легко обчислити, якщо взяти до уваги, що при кожному значенні  $l$  магнітне квантове число  $m$  набуває  $2l + 1$  значення. Підсумовуючи всі можливі значення  $l$ , які відповідають конкретному  $n$ , знаходимо вираз для кратності виродження  $g$  будь-якого рівня енергії  $E_n$ :

$$g = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = 1 + 3 + \dots + (n - 1) = n^2. \quad (7.41)$$

У спектроскопії прийнято спеціальну систему цифрово-літерних позначень, яка характеризує стани атомів. У цій системі за основу класифікації беруться орбітальні квантові числа для конкретних станів, кожному з яких ставиться у відповідність певний символ (певна літера):

$$l = 0 \rightarrow s, \quad l = 1 \rightarrow p, \quad l = 2 \rightarrow d, \quad l = 3 \rightarrow f, \quad l = 4 \rightarrow g, \quad l = 5 \rightarrow h, \quad (7.42)$$

а конкретні стани називаються  $s$ -станом,  $p$ -станом тощо. Такі позначання є даниною історичній назві певних серій спектральних ліній – *sharp* (різка), *principal* (головна), *diffuse* (розмита), *fundamental* (фундаментальна). Подальші символи є наступними (після літери  $f$ ) літерами латинського алфавіту. До цього символу додається (ставиться перед літерою) цифрове позначання головного квантового числа. Таким чином, стан, у якому  $n = 1, l = 0$ , має назву  $1s$ -стан, а стан з  $n = 3, l = 2$  має назву  $3d$ -стан. Якщо необхідно позначити величину магнітного квантового числа, то воно може ставитись у нижній частині відповідного літерного символу (напр.,  $1s_0$  або  $3d_1$ ).

Запишемо явний вигляд хвильової функції для двох найнижчих рівнів енергії:

$$1s_0 \text{ стан} \equiv \Psi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} e^{-\frac{Zr}{a}}, \quad 2s_0 \text{ стан} \equiv \Psi_{200} = \sqrt{\frac{Z^3}{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) e^{-\frac{Zr}{2a}},$$

$$2p_m \text{ стан} \equiv \Psi_{21m} = ir \sqrt{\frac{Z^5}{32\pi a^5}} e^{-\frac{Zr}{2a}} \begin{cases} \cos \theta, & m = 0, \\ \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, & m = \pm 1 \end{cases} \quad (7.43)$$

Згідно з імовірнісною інтерпретацією хвильової функції вираз  $|\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2$  має зміст густини ймовірності локалізації частинки в даному місці простору. Для задач атомної фізики дуже важливою є інша величина – густина радіальної локалізації електрона

$$D_{nlm}(r) = \int_{4\pi} r^2 |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 d\Omega, \quad \int_0^\infty D_{nlm}(r) dr = 1, \quad (7.44)$$

яка характеризує радіальний розподіл імовірності локалізації електрона у стані  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  в атомі.

Для атома водню (при  $Z = 1$ ) в основному  $1s$ -стані маємо

$$D_{100}(r) = \frac{4r^2}{a^3} e^{-2r/a}. \quad (7.45)$$

Графік цієї функції зображено на рис. 7.4.

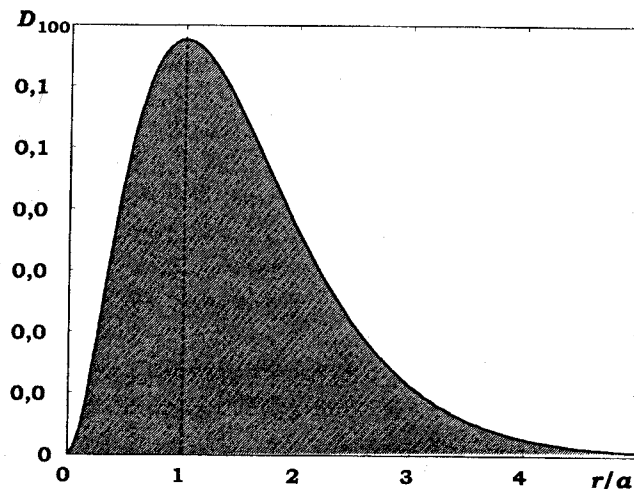


Рис. 7.4. Радіальний розподіл імовірності локалізації електрона в основному стані атома водню

Дослідивши функцію (7.42), знаходимо, що максимальне значення  $D_{100}(r)$  відповідає відстані від ядра  $r = a$ , яка є радіусом першої борівської орбіти. Таким чином, радіус першої борівської орбіти у квантовій механіці має зміст найімовірнішої відстані електрона від ядра в основному стані.

Виходячи із формул (4.43) можна представити в наочному вигляді просторово-кутові розподіли густини ймовірності  $|\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2$  локалізації електрона відносно ядра в системі координат, де вісь  $z$  є віссю квантування. Ці розподіли визначаються інтенсивністю кутової частини хвильової функції (7.43), тобто величиною  $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$ . Явний вигляд цих розподілів для основного та першого збудженого станів атома водню представлено на рис. 7.5.

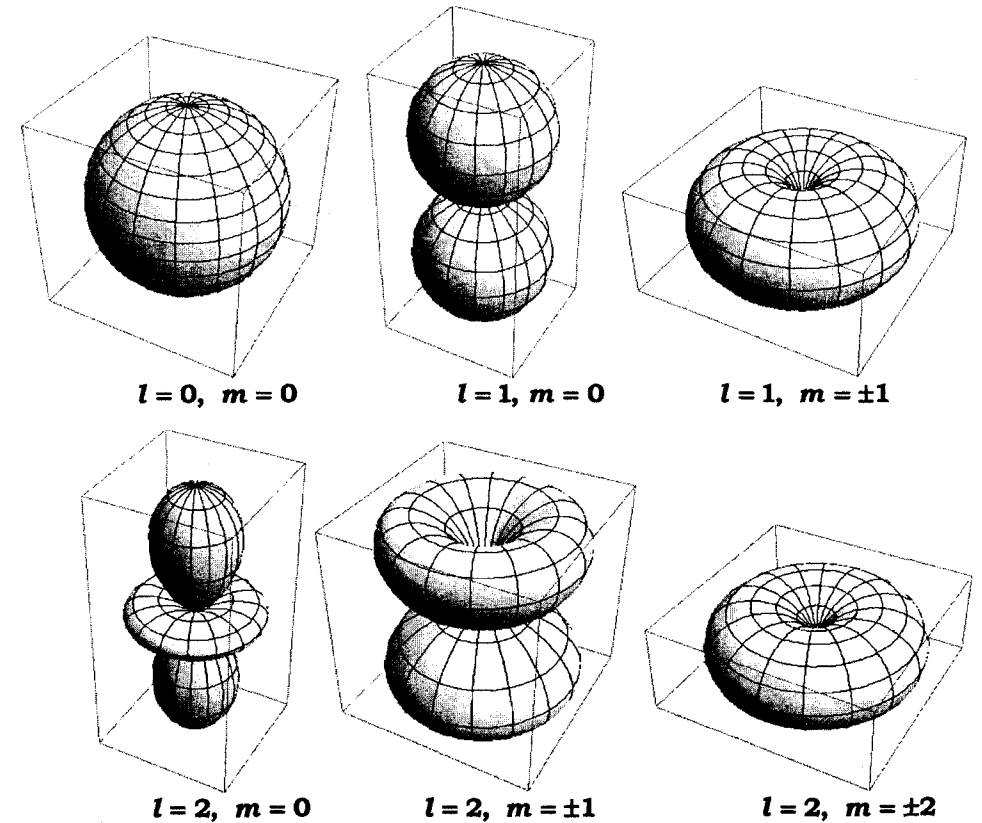


Рис. 7.5. Просторовий розподіл кутової густини ймовірності  $|Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2$  локалізації електрона відносно ядра для різних станів. Вісь квантування  $Z$  направлена вертикально

**Контрольні запитання**

1. Який мінімальний степеневий закон спаду хвильової функції може бути в її асимптотичному виразі на нескінченності?
2. Яка причина виродження хвильових функцій у атомах?
3. Визначити, за яких вагових коефіцієнтів суперпозиція хвильових функцій  $\Psi_{21m}$  буде сферично-симетричною.

**Література:** [1], § 49; [4], § 32.

## § 8. Рух частинки в полі центральної сили. Водневоподібні системи та магнітні властивості атома

### 8.1. Урахування впливу мас взаємодіючих частинок на їх рух і спектр рівнів енергії в полі центральної сили

Отримані результати описують рух частинок у полі центральної сили і, більш детально, – рух електрона в полі ядра. Якщо згадати постановку задачі і вигляд оператора Гамільтона, який містить тільки оператор кінетичної енергії частинки, то стає очевидним, що ці результати описують рух у системі координат, яка жорстко зв'язана із центром силового поля (у випадку атома – з ядром). У цій системі електрон і ядро виступають як нерівноправні об'єкти – електрон рухається в поля ядра, а ядро залишається нерухомим, незважаючи на те, що він розміщений у полі електрона. Обґрунтованість такої постановки задачі наведемо далі.

Зазвичай електрон і ядро є рівноправними об'єктами – електрон рухається під дією сили  $\vec{F}_{ne} = -\nabla\phi(|\vec{r}_n - \vec{r}_e|)$ , яка діє з боку ядра, а ядро рухається під дією сили  $\vec{F}_{en} = -\vec{F}_{ne}$ , яка діє на нього з боку електрона. Фактично нам потрібно переходити до задачі двох тіл з масами  $m_1$  і  $m_2$ , які характеризуються поточними координатами  $\vec{r}_1$  і  $\vec{r}_2$ . Оператор Гамільтона для такої задачі має вигляд

$$\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{\vec{r}_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (8.1)$$

і залежить від шести координат.

Перейдемо від лабораторної системи координат, де положення частинок задається векторами  $\vec{r}_1$  і  $\vec{r}_2$  до системи, яка пов'язана з центром мас і введемо дві координати – одна відповідає положенню центра мас  $\vec{R} = \{X, Y, Z\}$ , а інша – відносній координаті  $\vec{r} = \{x, y, z\}$ :

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \quad (8.2)$$

Виконавши перетворення частинних похідних за кожною з координат

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_{1,2}} &= \frac{\partial X}{\partial x_{1,2}} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_{1,2}} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_{1,2}}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} \pm \frac{\partial}{\partial x}, \\ \frac{\partial^2}{\partial x_{1,2}^2} &= \frac{m_{1,2}^2}{(m_1 + m_2)^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \pm \frac{2m_{1,2}}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \end{aligned}$$

у підсумку отримуємо оператор Гамільтона

$$\hat{H}(\vec{R}, \vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{\hbar^2}{2\tilde{\mu}}\Delta_{\vec{r}} + V(r), \quad M = m_1 + m_2, \quad \tilde{\mu} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (8.3)$$

і рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\Psi(\vec{R}, \vec{r}), \quad (8.4)$$

що має нові змінні. Величина  $\tilde{\mu} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  є приведеною масою.

Будемо шукати розв'язок (8.4) методом Фур'є, представивши хвильову функцію у вигляді добутку

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = U(\vec{R})\Psi(\vec{r}). \quad (8.5)$$

Підставивши (8.5) у (8.4), а потім розділивши отримане рівняння на (8.5), маємо

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}}U(\vec{R})}{U(\vec{R})} = -\frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2\tilde{\mu}}\Delta_{\vec{r}}\Psi(\vec{r}) + V(r)\Psi(\vec{r}) - E\Psi(\vec{r})\right\}}{\Psi(\vec{r})} = \alpha, \quad (8.6)$$

де  $\alpha$  – параметр, що не залежить від координат частинок. Прирівнюючи цей параметр до лівої частини (8.6), отримаємо рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}}U(\vec{R}) = \alpha U(\vec{R}), \quad (8.7)$$

яке описує вільний рух частинки із сумарною масою  $M$  і характеризується хвильовою функцією

$$U_P(\vec{R}) = C_1 \exp\left(i\frac{\vec{P}\vec{R}}{\hbar}\right) + C_2 \exp\left(-i\frac{\vec{P}\vec{R}}{\hbar}\right) \quad (8.8)$$

та відповідним власним значенням оператора кінетичної енергії для руху центра мас

$$\alpha_P = \frac{P^2}{2M}. \quad (8.9)$$

Підставляючи власне значення  $\alpha_P$  у рівняння, яке утворюється при порівнянні середньої частини (8.6) з параметром  $\alpha$ , приходимо до іншого рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{\mu}}\Delta_{\vec{r}}\Psi(\vec{r}) + V(r)\Psi(\vec{r}) = \tilde{E}\Psi(\vec{r}), \quad \tilde{E} = E - \alpha_P, \quad (8.10)$$

яке за своєю формою повністю збігається з рівнянням Шредінгера (7.1), що описує рух частинки з масою  $\mu$  у тому самому центральному полі  $V(r)$ , але не враховує рух джерела цього поля (зокрема, ядра). Відмінності полягають лише в тому, що в рівнянні (7.1) розглядалась реальна частинка з масою  $\mu$ , якій відповідала енергія  $E$ , а в (8.10) розглядається рух частинки з ефективною (приведеною) масою  $\tilde{\mu}$ , якій

$$\text{відповідає енергія } \tilde{E} = E + \frac{\hbar^2 P^2}{2M}.$$

Очевидно, що збіг рівнянь за тих самих граничних умов приводить до ідентичних розв'язків для хвильової функції та спектра енергій, які відповідають рівнянню (8.10):

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) \equiv \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (8.11)$$

$$\tilde{E}_n = -\frac{Z^2\tilde{\mu}e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (8.12)$$

Враховуючи зв'язок  $\tilde{E}_n$  і  $\tilde{\mu}$  з  $E_n$  та  $\mu$ , остаточно отримуємо розв'язки  $\Psi(\vec{R}, \vec{r})$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{R}, \vec{r}) &= U_P(\vec{R})\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \\ &= \left\{ C_1 \exp\left(i\frac{\vec{P}\vec{R}}{\hbar}\right) + C_2 \exp\left(-i\frac{\vec{P}\vec{R}}{\hbar}\right) \right\} R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (8.13)$$

і власні значення енергії атома

$$E_{nP} = -\frac{Z^2\tilde{\mu}e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} + \frac{P^2}{2M}, \quad (8.12)$$

які відповідають перебуванню електрона у стані з головним квантовим числом  $n$ , а центра мас атома – у стані з імпульсом  $\vec{P}$ .

У випадку руху електрона в полі ядра ( $m_1 = \mu$ ,  $m_2 = m_n \gg \mu$ ) маємо

$$M \approx m_n, \quad \tilde{\mu} = \frac{\mu}{1 + \mu/m_n} \approx \mu\left(1 - \frac{\mu}{M}\right).$$

Знаходимо остаточний вираз для власних значень енергії, які відповідають руху електрона в полі ядра зі скінченною масою  $M$ :

$$E_{nP} = -\frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \left(1 - \frac{\mu}{M}\right) + \frac{P^2}{2M}. \quad (8.13)$$

Із цього співвідношення видно, що спектр рівнів атома, а також відповідний спектр частот переходів

$$\omega_{kP', nP} = \frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^2} \left(1 - \frac{\mu}{M}\right) \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right| \pm \frac{P'^2 - P^2}{2M}, \quad (8.14)$$

які відповідають збудженню (або оберненому процесу – зменшенню енергії) атома, залежать від маси ядра та зміни імпульсу всієї системи. Це явище називають *ізотопічним зсувом*. Воно має дуже велике значення, наприклад, при розділенні ізотопів і збагаченні ядерного палива для ядерних реакторів (суміші великої кількості ядер  $U^{238}$  і відносно малої кількості ядер  $U^{235}$ ) ізотопом  $U^{235}$ , що ділиться під дією повільних нейтронів.

Із формули (8.14) видно, що вплив скінченності маси атома характеризується двома ефектами, які ведуть до зсуву частот випромінювання та поглинання. Перший ефект пов'язаний з наявністю приведеної маси  $\tilde{\mu}$ , що веде до зменшення енергій як початкового, так і кінцевого рівнів, між якими відбувається перехід, і до однакового пониження частот випромінювання та поглинання. Цей ефект відображає перший доданок у (8.14). Другий ефект пов'язаний зі зміною кінетичної енергії атома при поглинанні та випромінюванні, він відповідає другому доданку.

Коли атом жорстко зв'язаний із системою оточуючих атомів, можна вважати, що його повна маса  $M \rightarrow \infty$ . За таких умов формула (8.14) набуває вигляду

$$\omega_{kP', nP} \equiv \omega_{k, n} = \frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^3} \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right|, \quad (8.15)$$

що відповідає вже розглянутій модельній задачі про рух електрона у фіксованому центральному полі. У цьому випадку частота (8.15) відповідає як частоті випромінювання, так і частоті поглинання фотонів. Інакше виглядатиме випадок, якщо атом вільний. Його розглянемо далі.

## 8.2. Вплив маси атома і частоти переходів між рівнями його енергії на спектр частот випромінювання та поглинання

Формула (8.12) характеризує зв'язок повної енергії атома з енергією конкретного квантового рівня та кінетичною енергією руху атома в цьому стані як єдиного цілого. Для того, щоб визначити частоти випромінювання або поглинання при переході між цими станами, необхідно пов'язати частоту та імпульс фотона з характеристиками атома. Спочатку розглянемо задачу про випромінювання, якому відповідає умова  $E_{kP'} > E_{nP}$ . Для спрощення розрахунків обмежимося випадком, коли в початковому стані атом нерухомий, тобто  $\vec{P}' = 0$ .

Процес випромінювання фотона із частотою  $\omega_r$  характеризується законами збереження енергії та імпульсу

$$E_{kP'} - E_{nP} \equiv \hbar\omega_{kn} - \frac{P^2}{2M} = \hbar\omega_r, \quad \omega_{kn} = \frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^3} \left| \frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right|, \quad (8.16)$$

$$P = \hbar\omega_r n(\omega_r)/c. \quad (8.17)$$

У цих співвідношеннях  $\hbar\omega_{kn}$  – енергія переходу між рівнями атома;  $n(\omega_r)$  – показник заломлення середовища, у якому міститься атом, на частоті випромінювання  $\omega_r$ .

Підставляючи (8.17) у (8.16) отримуємо рівняння для визначення частоти  $\omega_r$ :

$$\omega_r^2 + \frac{2Mc^2\omega_r}{\hbar n(\omega_r)} - \frac{2Mc^2\omega_{kp}}{\hbar n(\omega_r)} = 0. \quad (8.18)$$

Розв'язок цього рівняння

$$\omega_r = -\frac{Mc^2}{\hbar n(\omega_r)} \pm \sqrt{\left\{ \frac{Mc^2}{\hbar n(\omega_r)} \right\}^2 + \frac{2Mc^2\omega_{kp}}{\hbar n(\omega_r)}} \quad (8.19)$$

знаходимо, виходячи з умови невід'ємності частоти випромінювання ( $\omega_r > 0$ ) та очевидної умови  $n(\omega_r)\hbar\omega_r/Mc^2 \ll 1$ . Розкладаючи квадратний корінь у (8.19) до другого порядку за величиною  $n(\omega_r)\hbar\omega_r/Mc^2 \ll 1$ , отримуємо остаточний вираз для частоти випромінювання

$$\omega_r \approx \omega_{kp} - \frac{\hbar\omega_{kp}^2 n(\omega_r)}{2Mc^2} = \omega_{kp} \left( 1 - \frac{\hbar\omega_{kp} n(\omega_r)}{2Mc^2} \right), \quad (8.20)$$

яка відрізняється від частоти переходу між рівнями енергії  $\omega_{kn}$ . Причина такого зсуву частоти пов'язана з тим, що частина енергії  $\hbar\omega_{kn}$ , яка виділяється при квантовому переході між рівнями, витрачається на випромінювання фотона, який має енергію  $\hbar\omega_r$  та імпульс (8.17), а частина – на прискорення атома в напрямку, протилежному напрямку фотона. Таке прискорення є наслідком закону збереження імпульсу.

Альтернативний процес поглинання тим самим атомом фотона з частотою  $\omega_a$  характеризується законами збереження

$$\hbar\omega_a = \hbar\omega_{kn} + \frac{P^2}{2M}, \quad (8.21)$$

$$P = \hbar\omega_a n(\omega_a)/c. \quad (8.22)$$

Із (8.21) і (8.22) отримуємо рівняння для знаходження частоти  $\omega_a$ :

$$\omega_a^2 - \frac{2Mc^2\omega_a}{\hbar n(\omega_r)} + \frac{2Mc^2\omega_{kp}}{\hbar n(\omega_r)} = 0. \quad (8.23)$$

Розв'язок цього рівняння має вигляд

$$\omega_a \approx \omega_{kp} + \frac{\hbar\omega_{kp}^2 n(\omega_a)}{2Mc^2} = \omega_{kp} \left( 1 + \frac{\hbar\omega_{kp} n(\omega_r)}{2Mc^2} \right). \quad (8.24)$$

Порівняння (8.20) і (8.24) показує, що частоти випромінювання  $\omega_r$  і поглинання  $\omega_a$  квантів при переході між ідентичною парою рівнів у атомі не збігаються між собою і відмінні від частоти  $\omega_{kn}$ , яка відповідає різниці енергій двох рівнів.

У випадку поглинання зсув частот пов'язаний з тим, що частина енергії падаючого фотона  $\hbar\omega_a$  витрачається на збудження атома, а частина на його прискорення, що викликано необхідністю виконання закону збереження імпульсу. Величина відносного розщеплення цих частот відповідає малій величині  $\pm\hbar\omega_{kp}n(\omega_a)/2Mc^2$ , яка зростає зі збільшенням частоти  $\omega_{kn}$ . Цей ефект розщеплення частот випроміню-



вання й поглинання стає дуже істотним в ультрафіолетовому та рентгєнівському діапазонах частот. Особливості впливу імпульсу віддачі на ефект розщеплення частот випромінювання й поглинання для атомів та інших джерел випромінювання й поглинання, які рухаються з релятивістською швидкістю, розглянуто нижче в § 34 при аналізі узагальненого ефекту Доплера. Особливо великого значення цей ефект набуває при його використанні для пригнічення самопоглинання в лазерних системах і ослаблення. Унаслідок цього понижуються вимоги до інверсної заселеності рівнів енергії. Ефект може бути використаний при створенні лазерів високої частоти, для роботи яких не потрібна умова інверсії.

### 8.3. Особливості спектра оптичних переходів лужних металів

Отримані результати, які описують особливості руху одиночного електрона в полі ядра, з певними застереженнями можна застосовувати до багатьох подібних систем (зокрема, до т. зв. воднеподібних атомів, серед яких є атоми лужних металів Li, Na, K, Rb, Cs тощо). Із хімії та атомної фізики добре відомо, що особливість електронної структури атома будь-якого з лужних металів із зарядом ядра  $Z$  полягає в тому, що  $Z-1$ -електрон сильно пов'язаний з ядром і вони розміщені біля нього в межах області, радіус якої набагато менший, ніж середня відстань до одного віддаленого електрона. Екранування поля ядра  $Z-1$  внутрішнім електроном приводить до того, що на зовнішній електрон діє поле, яке близьке до поля одного протона в атомі водню. При класичній інтерпретації спектр рівнів енергії цього віддаленого (валентного) електрона має збігатися зі спектром водню.

При строгому квантово-механічному аналізі треба врахувати, що хвильова функція будь-якої частинки завжди розподілена в просторі. Якщо брати за основу модель атома водню, то існує відмінна від нуля ймовірність того, що електрон у  $s$ -стані буде перебувати навіть у об'ємі ядра. Є всі підстави вважати, що подібні особливості будуть також і у валентного електрона в атомах лужних металів. Виходячи з цього, очевидно, що пряме застосування моделі атома водню до атома лужного металу є не зовсім коректним.

Розглянемо задачу про рух валентного електрона в центральному полі  $\phi(r)$ , якому відповідає потенціальна енергія  $V(r) = -e\phi(r)$ . Потенціал  $\phi(r)$  є результатом сумісної дії заряду ядра  $Ze$  та екрануючої дії роз-

поділених зарядів  $Z-1$  електрона. Таке екранування приводить до залежного від відстані ефективного заряду ядра, причому біля ядра екранування відсутнє й ефективний заряд ядра відповідає його повному значенню  $Ze$ , а на великій відстані він дорівнює  $e$ . Виходячи із цього очевидно, що енергія  $V(r)$  задовольняє граничні умови

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r}, & r \rightarrow 0; \\ -\frac{e^2}{r}, & r \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (8.25)$$

Для того, щоб їх задовольнити, можна ввести апроксимуючу залежність (апроксимацію Рідберга):

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{\beta e^2}{r^2}, \quad (8.26)$$

яка визначає таку змінну потенціальну енергію, яка забезпечує неперервний перехід між двома асимптотичними кривими (8.25). Принцип використання такої апроксимації показано на рис. 8.1. Підбір параметра  $\beta$  виконується з умови узгодження розрахованих і експериментальних спектрів випромінювання. Результати такого узгодження показують, що  $\beta \ll 1$ .

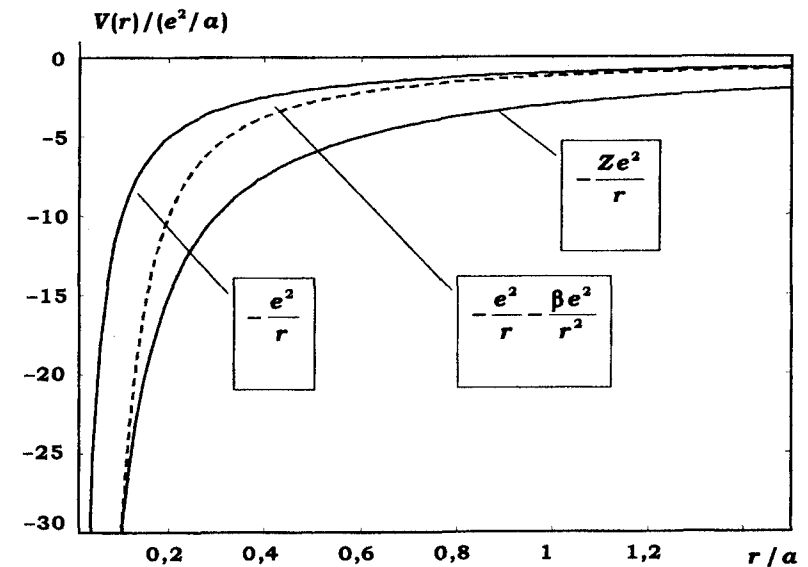


Рис. 8.1. Апроксимація потенціальної енергії для валентного електрона в атомі лужного металу

Підставимо розглянуту потенціальну енергію в рівняння Шредінгера для функції (7.16)  $U(r) = rR(r)$ , використовуючи нормовані координати (7.18)  $\rho = r/a$ . Отримаємо рівняння

$$\frac{d^2U}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}U + \frac{2\beta}{\rho^2}U + \frac{2}{\rho}U = -\varepsilon U, \quad (8.27)$$

яке є аналогом рівняння (7.19) для атома водню, але відрізняється від нього доданком  $\frac{2\beta}{\rho^2}U$  з апроксимуючим параметром.

У (8.27) можна об'єднати два доданки з однаковою залежністю від координати, ввівши ефективне орбітальне квантове число  $l'$ :

$$\frac{d^2U}{d\rho^2} - \frac{l'(l'+1)}{\rho^2}U + \frac{2}{\rho}U = -\varepsilon U, \quad (8.28)$$

яке визначається зі співвідношення

$$l(l+1) - 2\beta = l'(l'+1) \quad (8.29)$$

і відповідає (при  $\beta \ll 1$ ) величинам

$$l' = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - 2\beta} \approx -\frac{1}{2} \pm \left\{ \left(l + \frac{1}{2}\right) - \frac{\beta}{\left(l + \frac{1}{2}\right)} \right\}. \quad (8.30)$$

Виходячи з умови неперервності розв'язку ( $l' \rightarrow l$  при  $\beta \rightarrow 0$ ), слід залишити тільки додатний корінь у (8.29), тоді маємо

$$l' = l - \frac{\beta}{\left(l + \frac{1}{2}\right)}. \quad (8.31)$$

Подальший розрахунок повністю повторює всі результати (7.18) – (7.30) і приводить до рекурентного співвідношення

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= a_k \frac{2\sqrt{|\varepsilon|} \left[ k + l' + 1 - \frac{Z}{\sqrt{|\varepsilon|}} \right]}{k(k+1) + 2(k+1)(l'+1)} = \\ &= a_k \frac{2\sqrt{|\varepsilon|} \left[ k + l + 1 - \frac{\beta}{\left(l + \frac{1}{2}\right)} - \frac{Z}{\sqrt{|\varepsilon|}} \right]}{k(k+1) + 2(k+1)(l'+1)}, \end{aligned} \quad (8.32)$$

яке є аналогом (7.30), але відрізняється від нього доданком  $\beta/(l+1/2)$ .

Використовуючи, як це було зроблено при аналізі атома водню, заміну  $k+l+1=n$ , знаходимо умову обриву ланцюжка рекурентних співвідношень (8.32)

$$\frac{Z}{\sqrt{|\varepsilon|}} = n - \frac{\beta}{l+1/2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (8.33)$$

яка є аналогом умови (7.34) для атома водню. Із цієї умови знаходимо спектр можливих значень енергії електрона в атомі лужного металу

$$E_n = -\frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\left(n - \frac{\beta}{l+1/2}\right)^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (8.34)$$

Із (8.34) випливає, що наявність внутрішні електрони приводять до можливості часткового зняття виродження рівнів енергії та відповідних частот випромінювання й поглинання за орбітальним квантовим числом  $l$ .

## 8.4. Коливальні та обертальні стани двоатомної молекули

Використання приведеної маси  $\tilde{\mu} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  пари взаємодіючих частинок дозволяє звести задачу про взаємодію двох частинок до задачі одного тіла. Цей підхід можна використати для розрахунку енергетичного спектра, який відповідає колективному стану двоатомної молекули. Таку задачу можна розв'язати на основі використання радіального рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{\mu}} \frac{d^2U}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu} r^2} U + V(r)U = \tilde{E}U, \quad \tilde{E} = E + \frac{\hbar^2 P^2}{2M} \quad (8.35)$$

для частини радіальної хвильової функції  $U(r) = r\Psi(r)$  (7.16). У цьому рівнянні є складова

$$V_{\text{еф}}(r) = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu} r^2} + V(r), \quad (8.36)$$

яку можна вважати ефективною потенціальною енергією частинки з приведеною масою  $\tilde{\mu}$ .

Структура  $V_{\text{еф}}(r)$  відповідає молекулярному притягуванню на великій відстані за рахунок  $V(r) < 0$  (напр., за рахунок взаємодії Ван-дер-Ваальса для нейтральних атомів або за рахунок кулонівської взаємодії в молекулах типу  $\text{Na}^+\text{Cl}^-$  з іонним зв'язком) і відцентровому від-

штовхуванню за рахунок  $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu}r^2} > 0$  на малій відстані. Якісний вигляд  $V_{\text{еф}}(r)$  представлено на рис. 8.2.

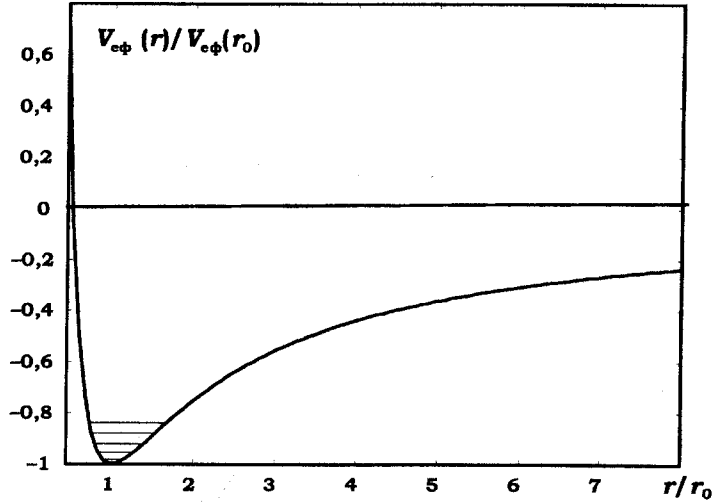


Рис. 8.2. Спектр коливальних рівнів енергії двоатомної молекули

В околі точки  $r_0$ , яка відповідає мінімуму  $V_{\text{еф}}(r_0)$ , ефективну потенціальну енергію  $V_{\text{еф}}(r)$  можна розкласти в ряд

$$V_{\text{еф}}(r) \approx \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu}r_0^2} + V(r_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 V_{\text{еф}}(r)}{dr^2} \Big|_{r_0} (r - r_0)^2. \quad (8.37)$$

Якщо зробити заміну

$$\frac{d^2 V_{\text{еф}}(r)}{dr^2} \Big|_{r_0} = \tilde{\mu}\omega^2, \quad (8.38)$$

то рівняння (8.35) у цій області зводиться до рівняння одномірного гармонічного осцилятора

$$-\frac{\hbar^2}{2\tilde{\mu}} \frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{\tilde{\mu}\omega^2}{2} (r - r_0)^2 U = \left\{ \tilde{E} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu}r_0^2} - V(r_0) \right\} U, \quad (8.39)$$

у якому ефективна енергія коливань малої амплітуди має вигляд еквідистантних рівнів

$$\tilde{E} - V(r_0) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu}r_0^2} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (8.40)$$

Ці рівні зображено на рис. 8.2 у нижній частині функції  $V_{\text{еф}}(r)$  біля її мінімуму.

Враховуючи явний вигляд для  $\tilde{E}$  (8.35), знаходимо остаточний вираз для спектра рівнів енергії двоатомної молекули

$$E = V(r_0) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\tilde{\mu}r_0^2} + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 P^2}{2M}. \quad (8.41)$$

Видно, що спектр рівнів енергії молекули є комбінацією обертальних і коливальних станів. Такий спектр рівнів матиме молекула, яка не містить електронів (напр., молекула, що складається з протона та антипротона). За наявності електронів до цих рівнів треба додати спектр електронних станів, які відповідають конкретній електронній конфігурації.

## 8.5. Електричний струм у атомі та орбітальний магнітний момент атома

Отриманий вираз для хвильової функції атомного електрона  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)P_l^{|m|}(\theta)e^{im\varphi}$  дозволяє обчислити густину електричного струму (6.14), пов'язаного з рухом електрона

$$\vec{j}_e = -\frac{ie\hbar}{2\mu} \{ \Psi_{nlm} \nabla \Psi_{nlm}^* - \Psi_{nlm}^* \nabla \Psi_{nlm} \}.$$

Враховуючи вид оператора градієнта у сферичній системі координат

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (8.42)$$

знайдемо три складових вектора густини струму, які направлені в напрямку відповідних ортів  $\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\varphi$  (рис. 8.3, а).

Радіальна компонента вектора  $\vec{j}_e$  дорівнює нулю

$$j_{er} = -\frac{ie\hbar}{2\mu} \{ |P_l^{|m|}(\theta)e^{im\varphi}|^2 R_{nl} \frac{\partial R_{nl}^*}{\partial r} - |P_l^{|m|}(\theta)e^{im\varphi}|^2 R_{nl}^* \frac{\partial R_{nl}}{\partial r} \} = 0 \quad (8.43)$$

унаслідок того, що  $R_{nl}(r)$  є дійсною функцією. Полярна компонента вектора  $\vec{j}_e$  дорівнює нулю

$$j_{e\theta} = -\frac{ie\hbar}{2\mu} \left\{ |R_{nl}e^{im\varphi}|^2 P_l^{|m|}(\theta) \frac{1}{r} \frac{\partial(P_l^{|m|}(\theta))^*}{\partial\theta} - |R_{nl}e^{im\varphi}|^2 (P_l^{|m|}(\theta))^* \frac{1}{r} \frac{\partial P_l^{|m|}(\theta)}{\partial\theta} \right\} = 0, \quad (8.44)$$

оскільки  $P_l^{|m|}(\theta)$  також є дійсною функцією.

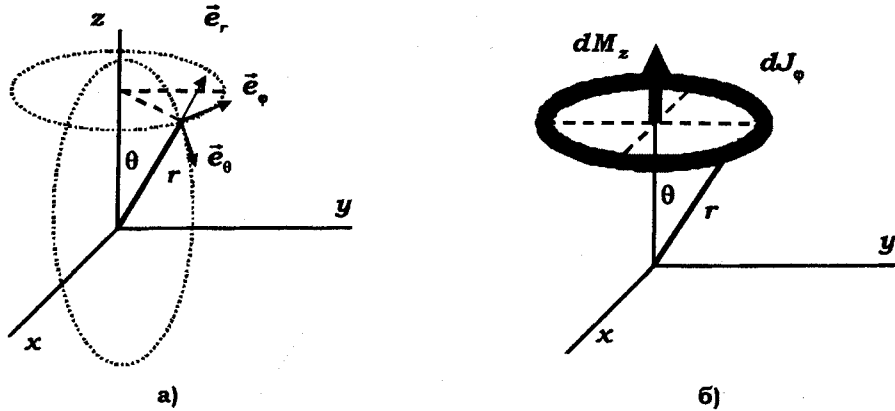


Рис. 8.3. Напрямок компонент вектора густини електричного струму  $\vec{j}_e$  в атомі (а) та елементарний кільцевий електричний струм і його магнітний момент (б)

Азимутальна компонента вектора  $\vec{j}_e$  відмінна від нуля й визначається виразом

$$j_{e\varphi} = -\frac{ie\hbar}{2\mu} \left\{ |R_{nl}P_l^{|m|}(\theta)|^2 \frac{e^{im\varphi}}{r \sin\theta} \frac{\partial e^{-im\varphi}}{\partial\varphi} - |R_{nl}P_l^{|m|}(\theta)|^2 \frac{e^{-im\varphi}}{r \sin\theta} \frac{\partial e^{im\varphi}}{\partial\varphi} \right\} = -\frac{me\hbar}{\mu r \sin\theta} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2. \quad (8.45)$$

Цей струм протікає по коловим траєкторіям у екваторіальній площині. Якщо умовно виділити трубку з перерізом  $d\sigma$  уздовж цієї траєкторії (рис. 8.3, б), то величина струму  $dJ$ , який перебуває в її межах, визначається виразом

$$dJ = -\frac{me\hbar}{\mu r \sin\theta} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 d\sigma. \quad (8.46)$$

Цьому елементарному коловому струму відповідає елементарний магнітний момент

$$dM_z = \frac{SdJ}{c} = -\frac{me\hbar}{\mu c} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 \pi r \sin\theta d\sigma, \quad (8.47)$$

орієнтований перпендикулярно контуру струму (уздовж осі  $z$ ), який охоплює площу  $S = \pi(r \sin\theta)^2$ . Цю формулу можна переписати в еквівалентному вигляді, якщо виразити її через величину об'єму  $dV = 2\pi r \sin\theta d\sigma$  трубки з елементарним струмом

$$dM_z = -\frac{me\hbar}{2\mu c} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dV. \quad (8.48)$$

Напрямок магнітного моменту, який створює кожний з подібних елементарних струмів, залежить тільки від знака магнітного квантового числа  $m$  і є однаковим для конкретного стану.

Повний магнітний момент визначається як сума (інтеграл) величин (8.48), які відповідають усім можливим контурам струмів

$$M_z = \int dM_z = - \int_{V \rightarrow \infty} \frac{me\hbar}{2\mu c} |\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)|^2 dV = -m \frac{e\hbar}{2\mu c}, \quad (8.49)$$

а його величина і знак проекції залежать тільки від магнітного квантового числа  $m$ .

Якщо згадати, що число  $m$  також визначає величину і знак проекції моменту імпульсу електрона в атомі  $L_z = m\hbar$ , то з (8.49) знаходимо гіромагнітне співвідношення для проекцій орбітальних магнітного та механічного моментів на вісь квантування  $z$ :

$$M_z = -\frac{e}{2\mu c} L_z. \quad (8.50)$$

Оскільки вісь  $z$  обрано довільно, то це співвідношення буде справедливим і для відношення моментів

$$\vec{M} = -\frac{e}{2\mu c} \vec{L}. \quad (8.51)$$

Знак "мінус" у (8.50) і (8.51) показує, що орбітальні магнітний і механічний моменти електрона в атомі завжди протилежно направлені.

Цікаво порівняти отримані вирази для моментів і гіромагнітного співвідношення, отримані строгим обчисленням на основі формул квантової механіки, з аналогічними виразами, які можна отримати з використанням класичної фізики. Припустимо, що електрон у атомі рухається зі швидкістю  $v$  по коловій орбіті з радіусом  $r$ , що відповідає частоті обертання  $f = v/2\pi r$ . Цьому руху відповідає електричний

струм  $J = -ef$ . Звідси можна знайти класичні вирази для механічного та магнітного моментів електрона:

$$L_{\text{кл}} = \mu vr, \quad M_{\text{кл}} = \frac{JS}{c} = -\frac{evr}{2c}. \quad (8.52)$$

Ці величини не збігаються з квантово-механічними аналогами й є некоректними. Причиною некоректності є наявність у кожному з виразів у (8.43) добутку координати та швидкості електрона, які не можуть одночасно мати точних значень.

Якщо з (8.52) знайти гіромагнітне співвідношення

$$M_{\text{кл}} = -\frac{e}{2\mu c} L_{\text{кл}}, \quad (8.53)$$

то видно, що воно повністю збігається з результатом (8.42), отриманим на основі формул квантової механіки. Цей результат відображає той факт, що рівняння квантової механіки неперервно переходять у класичну фізику. Специфіка вияву квантових явищ визначається наявністю сталої Планка  $\hbar$ , яка відсутня при класичному розгляді. Якщо результат строгого квантово-механічного розрахунку не містить цієї сталої, то він має збігатися з результатом розрахунку на основі класичної фізики. На жаль, зворотне твердження буде некоректним.

#### Контрольні запитання

1. Визначити окремо повні струми в атомі, які протікають у напрямку від ядра та в напрямку до ядра у стані  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ .
2. За яких умов частота фотона, який випромінюється при переході між рівнями енергії вільного атома, що рухається зі швидкістю  $\vec{v}$ , буде збігатися із частотою переходу між цими рівнями?
3. Яка фізична причина того, що частота випромінювання атома лужного металу відрізняється від частоти випромінювання аналогічного за масою водневоподібного атома?

**Література:** [1], § 50–54; [2], § 37.

## Розділ IV

### ТЕОРІЯ ПРЕДСТАВЛЕНЬ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

#### § 9. Теорія представлень для стаціонарних систем. Матричний формалізм у квантовій механіці

##### 9.1. Хвильова функція фізичної системи в довільному представленні

Одна з головних відмінностей квантової механіки від класичної полягає в тому, що в ній неможлива ситуація, коли одночасно всі фізичні величини мають точне значення й є сумісними. Поняття сумісності пов'язано з комутативністю операторів відповідних величин. Очевидно, що математичний апарат квантової механіки має бути адаптованим до цього. Найбільш оптимальним випадком є нижчевикладений опис конкретної системи й увесь розрахунковий апарат використовує як незалежну змінну ту величину, яка максимально відповідає конкретному аналізу.

Подібна ситуація давно відома і широко використовується в класичній фізиці. Наприклад, якщо ми досліджуємо нестационарний хвильовий процес, то його аналіз можна робити як у системі розрахунків,

де незалежною величиною є час, так і в системі, коли такою незалежною величиною є частота.

Перший метод опису (часове представлення) адаптований до випадку, коли наші прилади фіксують часову структуру хвильового процесу, наприклад, досліджують його за допомогою осцилографа. Очевидно, що в таких умовах (за будь-яких точних локальних часових вимірюваннях протягом скінченного часу) казати про спектр процесу можна лише опосередковано й з певною похибкою.

Другий метод опису (частотне представлення) адаптований до випадку, коли аналізується той самий процес за допомогою вимірювань його спектра. Відповідно при дослідженні тільки однієї частини спектра ми можемо мати досить точну інформацію про цю частину спектра, але не можемо точно визначити часову структуру хвильового процесу. Відповідь на питання про те, яке із цих представлень є більш точним і повним, є очевидною – вони еквівалентні й дають однаково адекватний опис.

Аналогічний випадок спостерігаємо у квантовій механіці. Розглянемо фізичну систему, яка описується хвильовою функцією  $\Psi(x, t)$ . Розкладемо цю функцію за власними функціями  $\Psi_n(x)$  оператора  $\hat{A}(x)$  фізичної величини  $A(x)$ , яка задана в цій системі:

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_n(x), \quad \hat{A}(x) \Psi_n(x) = A_n \Psi_n(x) \quad (9.1)$$

і за власними функціями  $\Psi_\alpha(x)$  іншого оператора  $\hat{B}(x)$  фізичної величини  $B(x)$ , яка також задана в цій системі:

$$\Psi(x, t) = \sum_\alpha b_\alpha(t) \Psi_\alpha(x), \quad \hat{B}(x) \Psi_\alpha(x) = B_\alpha \Psi_\alpha(x). \quad (9.2)$$

Аналогічні розклади можна зробити й тоді, коли власні функції  $\Psi_p(x)$  оператора  $\hat{P}(x)$  фізичної величини  $P(x)$  утворюють неперервний набір

$$\Psi(x, t) = \int g_p(t) \Psi_p(x) dp, \quad \hat{P}(x) \Psi_p(x) = P_p \Psi_p(x). \quad (9.3)$$

Зміст кожного з таких розкладів очевидний, оскільки він відображає формування проєкцій функції стану фізичної системи  $\Psi(x, t)$  на всі можливі стани  $\Psi_\alpha(x)$  і  $\Psi_n(x)$  та аналогічний розкладу довільного вектора за системою взаємно ортогональних одиничних векторів. При цьому зміст кожного коефіцієнта  $c_n(t)$  розкладу полягає в тому, що

величина  $|c_n(t)|^2$  є ймовірністю того, що в даний момент часу система  $\Psi(x, t)$  перебуває у стані  $\Psi_n(x)$  (у випадку дискретного спектра (9.2)). У випадку неперервного спектра (9.3) зміст коефіцієнта  $g_p(t)$  полягає в тому, що величина  $|g_p(t)|^2$  є густиною ймовірності перебування системи в одиничному інтервалі величин неперервного параметра  $p$ , для якого стан характеризується функцією  $\Psi_p(x)$ . Це відповідає тому, що величина  $|g_p(t)|^2 dp$  визначає ймовірність  $dW(p)$  того, що система перебуває у стані  $\Psi_p(x)$ .

Помножимо функцію  $\Psi(x, t)$ , яка задана розкладами (9.1) – (9.3), на  $\Psi^*(x, t)$  і проінтегруємо отримані добутки по всій області існування  $\Psi(x, t)$ , враховуючи ортогональність власних функцій. Отримаємо систему еквівалентних рівнянь

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \sum_n |c_n(t)|^2, \\ 1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha \sum_\beta b_\alpha^*(t) b_\beta(t) \int \Psi_\alpha^*(x) \Psi_\beta(x) dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2, \quad (9.3)$$

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \iint g_p^*(t) g_{p'}(t) \left\{ \int \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dx \right\} dp dp' = \int |g_p(t)|^2 dp.$$

При отриманні (9.3) враховано, що для хвильових функцій, які відповідають дискретному спектру, маємо  $\int \Psi_n^*(x) \Psi_m(x) dx = \delta_{nm}$ , а для функцій, які відповідають неперервному спектру –  $\int \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p')$ , де  $\delta_{nm}$  – символ Кронекера,  $\delta(p - p')$  – дельта-функція Дірака. Повторюючи цю процедуру з використанням операторів різних величин, можна утворити ланцюжок рівностей

$$1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx = \sum_\alpha |b_\alpha(t)|^2 = \sum_n |c_n(t)|^2 = \int |g_p(t)|^2 dp = \dots, \quad (9.4)$$

у якому кожний із членів дорівнює 1.

Зробимо інтерпретацію ланцюжка рівностей (9.4). Рівність  $1 = \int |\Psi(x, t)|^2 dx$ , яка впливає з імовірнісного змісту величини  $|\Psi(x, t)|^2$ , має зміст повної ймовірності перебування частинки де-небудь у просторі. Відповідно зміст рівності  $\sum_n |c_n(t)|^2 = 1$  також ви-

пливає з імовірнісного змісту величини  $c_n(t)$  і полягає в тому, що повна ймовірність реалізації хоча б одного з можливих значень величини  $A_n$  також дорівнює 1. Така сама інтерпретація рівності  $\int |g_p(t)|^2 dp = 1$  – це повна ймовірність реалізації будь-якого конкретного значення величини  $P_p$ , яка розподілена неперервно.

Зауважимо, що процес розкладу функції за будь-яким з повних наборів взаємно ортогональних функцій не змінює властивостей функції – уся інформація про властивості системи, яка раніше містилась у  $\Psi(x,t)$ , тепер міститься в наборі дискретних  $c_n(t)$  або неперервних  $g_p(t)$  коефіцієнтів. Змінюється тільки інтерпретація – якщо зміст  $|\Psi(x,t)|^2$  полягає в тому, що це є густиною ймовірності реалізації конкретної координати  $x$ , то  $|g_p(t)|^2$  – це густина ймовірності реалізації конкретного значення величини  $P$ . Виходячи з цих обставин можна вважати, що дискретний  $\{c_n(t)\}$  або неперервний  $\{g_p(t)\}$  набір відповідних коефіцієнтів розкладу має всі властивості хвильової функції й власне є хвильовою функцією в новому представленні (відповідно в  $A$ -представленні чи  $P$ -представленні).

Узагальнюючи, сформулюємо правило переходу від одного представлення до іншого. Для того, щоб перейти від "старого"  $A$ -представлення до "нового"  $B$ -представлення, необхідно:

- знайти власні функції  $\Psi_\beta(A)$  оператора  $\hat{B}(A)$  в  $A$ -представленні:

$$\hat{B}(A)\Psi_\beta(A) = B_\beta\Psi_\beta(A); \quad (9.5)$$

- розкласти хвильову функцію системи  $\Psi(A,t)$ , яка задана в  $A$ -представленні, за цими власними функціями:

$$\Psi(A,t) = \sum_\beta c_\beta(t)\Psi_\beta(A) \text{ – для дискретного спектра,} \quad (9.6, a)$$

$$\Psi(A,t) = \int c_\beta(t)\Psi_\beta(A)d\beta \text{ – для неперервного спектра;} \quad (9.6, б)$$

- дискретний або неперервний набір коефіцієнтів  $c_\beta(t)$  й є хвильовою функцією тієї самої системи  $\Psi(A,t)$  у "новому"  $B$ -представленні.

## 9.2. Оператор фізичної величини в довільному представленні

Визначимо правило переведення довільного оператора  $\hat{L}(A)$  від "старого"  $A$ -представлення до "нового"  $B$ -представлення. Будемо виходити із загального означення оператора

$$\hat{L}(A)\Psi(A) = \varphi(A) \quad (9.7)$$

як процедури, що ставить функцію  $\varphi(A)$  відповідно до функції  $\Psi(A)$ . Розкладемо функції  $\varphi(A)$  і  $\Psi(A)$  за власними функціями  $\Psi_\beta(A)$  оператора  $\hat{B}(A)$ :

$$\Psi(A,t) = \sum_\beta c_\beta(t)\Psi_\beta(A), \quad \varphi(A,t) = \sum_\beta b_\beta(t)\Psi_\beta(A) \quad (9.10)$$

і підставимо ці розклади в (9.7):

$$\sum_\beta \hat{L}(A)\Psi_\beta(A)c_\beta(t) = \sum_\beta b_\beta(t)\Psi_\beta(A).$$

Якщо помножити це рівняння на  $\Psi_\alpha^*(A)$  і проінтегрувати по всьому інтервалу зміни величини  $A$ , то отримаємо рівняння

$$\sum_\beta L_{\alpha\beta}c_\beta(t) = b_\alpha(t), \quad (9.11)$$

яке повністю аналогічне означенню оператора (9.7). У цьому рівнянні введено величину

$$L_{\alpha\beta} = \int \Psi_\alpha^*(A)\hat{L}(A)\Psi_\beta(A)dA, \quad (9.12)$$

яку називають *матричним елементом оператора*. У рівнянні (9.11) матричний елемент  $L_{\alpha\beta}$  оператора  $\hat{L}(A)$  переводить (ставить у відповідність) коефіцієнт  $b_\alpha(t)$  кожному коефіцієнту  $c_\beta(t)$ , тобто виконує роль оператора в  $B$ -представленні.

У випадку неперервного спектра власних значень оператора  $\hat{B}(A)$  маємо

$$\Psi(A,t) = \int c_{p'}(t)\Psi_{p'}(A)dp', \quad \varphi(A,t) = \int b_{p'}(t)\Psi_{p'}(A)dp'. \quad (9.13)$$

Після підстановки (9.13) у (9.7) і домноження обох частин отриманого рівняння на  $\Psi_{p'}^*(A)$  і подальшого його інтегрування за  $A$ , знаходимо

$$\int \left\{ \int \Psi_{p'}^*(A)\hat{L}(A)\Psi_{p'}(A)dA \right\} c_{p'}(t)dp' = \int \left\{ \int \Psi_{p'}^*(A)\Psi_{p'}(A)dA \right\} b_{p'}(t)dp'. \quad (9.14)$$



Якщо врахувати, що для випадку неперервного спектра  $\int \Psi_p^*(A)\Psi_{p'}(A)da = \delta(p - p')$ , то перетворене рівняння (9.7) набуде остаточного вигляду

$$\int L_{pp'}c_{p'}(t)dp' = b_p(t), \quad (9.15)$$

який за структурою аналогічний (9.11). У цьому рівнянні матричний елемент  $L_{pp'}$  оператора  $\hat{L}(A)$  перетворює систему неперервно розподілених коефіцієнтів  $c_{p'}(t)$  на аналогічні коефіцієнти  $b_p(t)$ , тобто виконує роль оператора в  $B$ -представленні.

Таким чином, у загальному випадку в довільному представленні функцію оператора  $\hat{L}$  відіграє сукупність матричних елементів  $L_{\alpha\beta}$ , а сам оператор можна зобразити у вигляді матриці

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{1f} \\ L_{21} & L_{2f} \\ L_{f1} & L_{ff} \end{pmatrix}. \quad (9.16)$$

Нагадаємо деякі означення, які стосуються матриць, а саме:

*матриця  $\hat{L}^*$  називається комплексно спряженою* щодо матриці  $\hat{L}$ , якщо кожний її матричний елемент  $L_{\alpha\beta}^*$  є комплексно спряженим до матричного елемента  $L_{\alpha\beta}$  матриці  $\hat{L}$ ;

*матриця  $\tilde{\hat{L}}$  називається транспонованою* щодо матриці  $\hat{L}$ , якщо кожний її матричний елемент  $L_{\beta\alpha}$  є транспонованим до матричного елемента  $L_{\alpha\beta}$  матриці  $\hat{L}$ ;

*матриця  $\hat{L}^{\dagger} \equiv \hat{L}^{*+}$  називається комплексно спряженою транспонованою* (або *спряженою*) щодо матриці  $\hat{L}$ , якщо кожний її матричний елемент  $L_{\beta\alpha}^{\dagger}$  є комплексно спряженим і транспонованим до матричного елемента  $L_{\alpha\beta}$  матриці  $\hat{L}$ ;

*матриця називається самоспряженою* (ермітовою) щодо матриці  $\hat{L}$ , якщо для кожного матричного елемента виконується умова  $L_{\beta\alpha}^{\dagger} = L_{\alpha\beta}$ . Якщо врахувати конкретний вигляд матричного елемента (9.12), то видно, що означення самоспряженої (ермітової) матриці еквівалентне умові існування самоспряженого (ермітового) опера-

тора, яка є базовою при побудові математичного апарата квантової механіки.

Розглянемо вид довільного оператора у власному представленні, тобто знайдемо вид оператора  $\hat{B}(A)$  у  $B$ -представленні. Для цього спочатку з рівняння (9.5) знайдемо власні функції  $\Psi_{\beta}(A)$  оператора  $\hat{B}(A)$  в  $A$ -представленні. Використовуючи означення (9.12) і рівняння (9.5), знайдемо явний вид оператора  $\hat{B}(A)$  у  $B$ -представленні:

$$B_{\alpha\beta} = \int \Psi_{\alpha}^*(A)\hat{B}(A)\Psi_{\beta}(A)dA = B_{\alpha} \int \Psi_{\alpha}^*(A)\Psi_{\beta}(A)dA = B_{\alpha}\delta_{\alpha\beta}. \quad (9.17)$$

Бачимо, що у власному представленні будь-який оператор має вигляд діагональної матриці.

Для ілюстрації отриманих співвідношень зробимо перехід від координатного представлення ( $x$ -представлення) до імпульсного представлення ( $p_x$ -представлення). Згідно з умовами (9.5) – (9.6) спочатку на основі рівняння

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{p_x}(x) = p_x \Psi_{p_x}(x) \quad (9.18)$$

знайдемо власні функції оператора  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  у координатному представленні

$$\Psi_{p_x}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(i \frac{p_x x}{\hbar}). \quad (9.19)$$

Далі розкладемо хвильову функцію системи  $\Psi(x, t)$  за цими власними функціями:

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_{p'_x}(t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(i \frac{p'_x x}{\hbar}) dp'_x. \quad (9.20)$$

Якщо домножити цю рівність на  $\Psi_{p_x}^*(x)$ , а потім проінтегрувати за координатою  $x$ , то отримаємо вираз для хвильової функції в імпульсному представленні

$$c_{p_x}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) \exp(-i \frac{p_x x}{\hbar}) dx. \quad (9.21)$$

Далі знайдемо вид операторів координати та імпульсу в  $p_x$ -представленні. Оператор імпульсу в імпульсному представленні зображено діагональною матрицею і має вигляд

$$p_{p_x p'_x} = p_x \delta(p_x - p'_x), \quad (9.22)$$

який відповідає діагональній неперервній матриці.

Оператор координати визначається при послідовному перетворенні формули

$$\begin{aligned} x_{p_x p'_x} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i p'_x x}}{\sqrt{2\pi\hbar}} x \frac{e^{i p_x x}}{\sqrt{2\pi\hbar}} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p'_x}^* (-i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}) \Psi_{p_x} dx = \\ &= (-i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}) \delta(p_x - p'_x). \end{aligned} \quad (9.23)$$

Можна знайти більш зручну формулу для цього оператора, якщо використати його загальне означення

$$\int_{-\infty}^{\infty} x_{p_x p'_x} c_{p'_x}(t) dp'_x = b_{p_x}(t). \quad (9.24)$$

Підставляючи в цю формулу вираз (9.23) та інтегруючи отриманий вираз по частинах, а також беручи до уваги, що  $c_{p'_x}(t)|_{-\infty}^{\infty} = 0$ , знаходимо

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}) \delta(p_x - p'_x) c_{p'_x}(t) dp'_x = \\ &= -i\hbar \delta(p_x - p'_x) c_{p'_x}(t) |_{-\infty}^{\infty} + i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \delta(p_x - p'_x) \frac{\partial c_{p'_x}(t)}{\partial p_x} dp'_x = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x} c_{p_x}(t) = b_{p_x}(t). \end{aligned} \quad (9.25)$$

З останньої рівності бачимо, що оператор координати  $\hat{x}$ , який перетворює функцію  $c_{p_x}(t)$  на функцію  $b_{p_x}(t)$  в імпульсному  $p_x$ -представленні має вигляд

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}, \quad (9.26)$$

симетричний і комплексно спряжений до введеного раніше оператора імпульсу  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  у координатному представленні.

### 9.3. Середнє значення фізичної величини в довільному представленні

У координатному представленні середнє значення будь-якої фізичної величини  $L(x)$  у системі із хвильовою функцією  $\Psi(x,t)$  обчислюється за формулою  $\langle L(t) \rangle = \int \Psi^*(x,t) \hat{L}(x) \Psi(x,t) dx$ . Розглянемо правило використання цього співвідношення в довільному  $B$ -представленні. Для цього, як показано в (9.5), спочатку необхідно знайти власні функції  $\Psi_\beta(x)$  оператора  $\hat{B}(x)$  у координатному представленні, а потім розкласти хвильову функцію системи  $\Psi(x,t)$  за цими власними функціями:  $\Psi(x,t) = \sum_\beta c_\beta(t) \Psi_\beta(x)$ . Підставляючи цей розклад у вираз для знаходження  $\langle L(t) \rangle$ , отримуємо

$$\langle L(t) \rangle = \sum_\alpha \sum_\beta c_\alpha^*(t) L_{\alpha\beta} c_\beta(t). \quad (9.26)$$

Аналогічну залежність отримуємо, коли власні значення оператора  $\hat{B}(x,t)$  утворюють неперервний спектр і відповідають власним функціям  $\Psi_p(x)$ . У цьому випадку розклад хвильової функції системи в координатному представленні за функціями  $\Psi_p(x)$  має вигляд

$$\Psi(x,t) = \int c_p(t) \Psi_p(x) dp.$$

Використовуючи це співвідношення, отримуємо вираз для визначення середнього значення фізичної величини  $L(x)$  у довільному  $B$ -представленні

$$\langle L(t) \rangle = \iint c_p^*(t) L_{pp'} c_{p'}(t) dp dp'. \quad (9.27)$$

### 9.4. Визначення власних функцій і власних значень у матричному представленні

Розглянемо рівняння для визначення власних функцій і власних значень у довільному  $A$ -представленні. У координатному представ-

ленні власні функції  $\varphi_n(x)$  і власні значення  $L_n$  довільного оператора  $\hat{L}(x)$  знаходять з рівняння

$$\hat{L}(x)\varphi(x) = L\varphi(x). \quad (9.28)$$

Нам необхідно знайти аналог цього рівняння в  $A$ -представленні. Для того, щоб перейти до  $A$ -представлення, необхідно зробити певні дії (9.5) – (9.6) і насамперед знайти власні функції оператора  $\hat{A}(x)$ :

$$\hat{A}(x)\Psi_\beta(x) = A_\beta\Psi_\beta(x). \quad (9.29)$$

Припустимо, що спектр власних значень оператора  $\hat{A}(x)$  містить  $f$  величин. Розкладемо функцію  $\varphi(x)$  за власними функціями  $\Psi_\beta(x)$ :

$$\varphi(x) = \sum_{\beta=1}^f c_\beta \Psi_\beta(x) \quad (9.30)$$

і підставимо отриманий вираз (9.30) у (9.28). Якщо домножити обидві частини утвореного рівняння на  $\Psi_\alpha^*(x)$  і проінтегрувати за координатою  $x$ , то отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{\beta=1}^f L_{\alpha\beta} c_\beta = Lc_\alpha, \quad L_{\alpha\beta} = \int \Psi_\alpha^*(x) \hat{L}(x) \Psi_\beta(x) dx. \quad (9.31)$$

Вона є повним аналогом рівняння (9.28), що відповідало координатному представленню, і призначена для визначення коефіцієнтів  $c_\alpha$ , які є власними функціями оператора  $\hat{L}(A) \equiv \{L_{\alpha\beta}\}$  в  $A$ -представленні та власних значень  $L$  цього оператора. У розгорнутому вигляді ця система буде такою:

$$\begin{cases} c_1(L_{11} - L) + c_2L_{12} + \dots + c_fL_{1f} = 0, \\ c_1L_{21} + c_2(L_{22} - L) + \dots + c_fL_{2f} = 0, \\ \dots \\ c_1L_{f1} + c_2L_{f2} + \dots + c_f(L_{ff} - L) = 0. \end{cases} \quad (9.32)$$

Для того, щоб ця система мала нетривіальні розв'язки, необхідно, щоб її визначник дорівнював нулю:

$$\Delta = \begin{vmatrix} L_{11} - L & L_{12} & \dots & L_{1f} \\ L_{21} & L_{22} - L & \dots & L_{2f} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ L_{f1} & L_{f2} & \dots & L_{ff} - L \end{vmatrix} = 0. \quad (9.33)$$

Розкривши визначник, отримуємо алгебраїчне рівняння  $f$ -го порядку щодо власних значень  $L$ :

$$L^f + A_1L^{f-1} + \dots + A_{f-1}L + A_f = 0. \quad (9.34)$$

Розв'язки цього рівняння  $L^{(1)}, L^{(2)}, \dots, L^{(f)}$  є власними значеннями оператора  $\hat{L}(A) \equiv \{L_{\alpha\beta}\}$  в  $A$ -представленні. Якщо підставляти по черзі кожне з цих власних значень у систему (9.32), то можна знайти набори коефіцієнтів  $\{C_\alpha^{(i)}\}$ , що відповідають конкретним власним значенням  $L^{(i)}$ :

$$L^{(1)} \Leftrightarrow \{C_\beta^{(1)}\}, \quad L^{(2)} \Leftrightarrow \{C_\beta^{(2)}\}, \quad L^{(f)} \Leftrightarrow \{C_\beta^{(f)}\}. \quad (9.35)$$

Кожний такий набір коефіцієнтів  $\{C_\alpha^{(i)}\}$  є однією з власних функцій оператора  $\hat{L}(x)$  в  $A$ -представленні.

### Контрольні запитання

1. Чим відрізняються комплексно-спряжена та спряжена матриці?
2. Які операції необхідно виконати при здійсненні переходу між довільними представленнями?
3. Якщо матричне представлення є універсальним і найбільш загальним, то як можна зобразити в ньому величину, що змінюється неперервно?

**Література:** [1], § 38–45.

## § 10. Теорія представлень для нестационарних систем

### 10.1. Нестационарне рівняння Шредінгера в матричному вигляді

Розглянуті вище правила переходу до довільного матричного представлення стосувались стаціонарних систем. Еволюція нестационарної фізичної системи у квантовій механіці в координатному представленні описується нестационарним рівнянням Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}(x,t)\Psi(x,t). \quad (10.1)$$

Знайдемо аналог цього рівняння в  $A$ -представленні. Для цього спочатку знайдемо власні функції оператора  $\hat{A}(x)$ :

$$\hat{A}(x)\Psi_\beta(x) = A_\beta \Psi_\beta(x), \quad (10.2)$$

а потім розкладемо функцію  $\Psi(x,t)$  за власними функціями  $\Psi_\beta(x)$ :

$$\Psi(x,t) = \sum_\beta c_\beta(t)\Psi_\beta(x). \quad (10.3)$$

Підставивши (10.3) у (10.1), отримаємо

$$i\hbar \sum_\beta \frac{\partial c_\beta(t)}{\partial t} \Psi_\beta(x) = \sum_\beta c_\beta(t) \hat{H}(x,t) \Psi_\beta(x). \quad (10.4)$$

Якщо домножити обидві частини цього рівняння на  $\Psi_\alpha^*(x)$ , а потім проінтегрувати за змінною  $x$ , то отримаємо нестационарне рівняння Шредінгера в довільному  $A$ -представленні:

$$i\hbar \frac{\partial c_\alpha(t)}{\partial t} = \sum_\beta H_{\alpha\beta}(t) c_\beta(t), \quad H_{\alpha\beta}(t) = \int \Psi_\alpha^*(x) \hat{H}(x,t) \Psi_\beta(x) dx. \quad (10.5)$$

Особливо простого вигляду рівняння (10.5) набуває в стаціонарному випадку  $\hat{H} \neq F(t)$  в енергетичному представленні ( $E$ -представленні), яке є власним щодо оператора Гамільтона  $\hat{H}(x)$ . Для цього представлення власні функції (10.2) знаходять з рівняння

$$\hat{H}(x)\Psi_\beta(x) = E_\beta \Psi_\beta(x), \quad (10.6)$$

а матричний елемент оператора Гамільтона набуває вигляду діагональної матриці  $H_{\alpha\beta} = E_\alpha \delta_{\alpha\beta}$ . Підставляючи цей результат у (10.5), отримуємо просте рівняння

$$i\hbar \frac{\partial c_\alpha(t)}{\partial t} = E_\alpha c_\alpha(t), \quad (10.7)$$

яке має розв'язок

$$c_\alpha(t) = e^{i \frac{E_\alpha t}{\hbar}}. \quad (10.8)$$

Таким чином, власна функція оператора Гамільтона в  $E$ -представленні в стаціонарному випадку є періодично осцилюючою функцією.

## 10.2. Рівняння руху для операторів у матричній формі

Рівняння (10.5) визначає еволюцію хвильової функції, яка задана в довільному матричному представленні. Знайдемо рівняння еволюції (рівняння руху) для оператора  $\hat{L}(x,t)$  довільної фізичної величини  $L(x,t)$ . У координатному представленні це рівняння має вигляд (6.23)

$$\frac{d\hat{L}}{dt} = \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{L}\hat{H}].$$

Для того, щоб знайти вигляд цього рівняння в  $\hat{A}$ -представленні, використаємо співвідношення (9.26):

$$\langle L(t) \rangle = \sum_{\alpha,\beta} c_\alpha^*(t) L_{\alpha\beta} c_\beta(t)$$

для обчислення середнього значення  $\langle L(t) \rangle$  в  $\hat{A}$ -представленні. У цьому виразі набір коефіцієнтів  $c_\beta(t)$  знаходимо з розкладу (10.3) для функції  $\Psi(x,t)$ , який є її аналогом у  $A$ -представленні.

Знайдемо повну похідну від  $\langle L(t) \rangle$  за часом

$$\frac{d \langle L(t) \rangle}{dt} = \sum_{\alpha,\beta} \left\{ \frac{\partial c_\alpha^*}{\partial t} L_{\alpha\beta} c_\beta + c_\alpha^* \frac{\partial L_{\alpha\beta}}{\partial t} c_\beta + c_\alpha^* L_{\alpha\beta} \frac{\partial c_\beta}{\partial t} \right\}. \quad (10.9)$$

Підставляючи в (10.9) відповідні частинні похідні

$$\frac{\partial c_\alpha^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_\gamma H_{\alpha\gamma}^* c_\gamma^* = -\frac{1}{i\hbar} \sum_\gamma H_{\gamma\alpha} c_\gamma^*, \quad \frac{\partial c_\beta}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_\gamma H_{\beta\gamma} c_\gamma, \quad (10.10)$$

отримані з нестационарного рівняння Шредінгера (10.5), приходимо до рівняння

$$\frac{d \langle L(t) \rangle}{dt} = \sum_{\alpha,\beta} c_\alpha^* \frac{\partial L_{\alpha\beta}}{\partial t} c_\beta + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left\{ c_\alpha^* L_{\alpha\beta} H_{\beta\gamma} c_\gamma \right\} - \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \left\{ c_\gamma^* H_{\gamma\alpha} L_{\alpha\beta} c_\beta \right\}. \quad (10.11)$$

Якщо в (10.11) зробити заміну індексів підсумовування (у другій сумі зробити заміну  $\beta \leftrightarrow \gamma$ , а в третій –  $\alpha \leftrightarrow \gamma$ ), то отримаємо

$$\frac{d \langle L(t) \rangle}{dt} = \sum_{\alpha,\beta} \left\{ c_\alpha^* \frac{\partial L_{\alpha\beta}}{\partial t} c_\beta \right\} + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ c_\alpha^* \left( \sum_\gamma L_{\alpha\gamma} H_{\gamma\beta} - \sum_\gamma H_{\alpha\gamma} L_{\gamma\beta} \right) c_\beta \right\}. \quad (10.12)$$

Якщо додатково врахувати правило множення матриць

$$\sum_\gamma L_{\alpha\gamma} H_{\gamma\beta} \equiv (\hat{L}\hat{H})_{\alpha\beta}, \quad \sum_\gamma H_{\alpha\gamma} L_{\gamma\beta} \equiv (\hat{H}\hat{L})_{\alpha\beta},$$

то співвідношення (10.12) набуває остаточно вигляду

$$\frac{d \langle L(t) \rangle}{dt} = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha}^* \left\{ \frac{\partial L_{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\widehat{L}\widehat{H}]_{\alpha\beta} \right\} c_{\beta}. \quad (10.13)$$

Це співвідношення має зміст похідної за часом від середнього значення величини  $L(x, t)$ .

З іншого боку, якби ми знали вид оператора  $\frac{d\widehat{L}}{dt}$ , то відповідно до загального правила визначення середніх величин у довільному представленні (9.26) ми змогли б обчислити середнє значення величини  $\frac{dL(x, t)}{dt}$ , використовуючи формулу

$$\langle \frac{dL(t)}{dt} \rangle = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha}^* \left\{ \frac{d\widehat{L}}{dt} \right\}_{\alpha\beta} c_{\beta}. \quad (10.14)$$

Якщо взяти до уваги, що операції усереднення за різними станами та диференціювання за часом взаємно незалежні й їх можна міняти місцями, то можна вважати, що ліві частини формул (10.13) і (10.14) рівні між собою, тобто  $\langle \frac{dL(t)}{dt} \rangle = \frac{d \langle L(t) \rangle}{dt}$ . Виходячи з цього, рівними будуть між собою й праві частини цих формул, звідки випливає рівняння руху для оператора

$$\left( \frac{d\widehat{L}(t)}{dt} \right)_{\alpha\beta} = \frac{\partial L_{\alpha\beta}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\widehat{L}\widehat{H}]_{\alpha\beta}. \quad (10.15)$$

Видно, що структура цього рівняння збігається з виглядом аналогічного рівняння (6.23) у координатному представленні.

### 10.3. Представлення Шредінгера

У формалізованому апараті квантової механіки до поняття *представлення* належать не тільки правила переходу від однієї незалежної змінної до іншої (за винятком часу), але й методи перетворення операторів і хвильових функцій, при яких залежність від часу переноситься на один із цих об'єктів. Застосування таких перетворень дозволяє спростити обчислення для багатьох задач. Зокрема це стосується випадків, коли ви-

користується оператор, який явно не залежить від часу. У таких випадках можна зробити такі перетворення системи, коли зміна її властивостей із часом визначається тільки зміною хвильової функції. Таке представлення називають *представленням Шредінгера*.

Еволюція хвильової функції в загальному випадку визначається нестационарним рівнянням Шредінгера (10.1):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \widehat{H}(x, t) \Psi(x, t),$$

яке дозволяє, знаючи  $\Psi(x, 0)$ , знайти  $\Psi(x, t)$ . Таку відповідність між цими функціями можна представити у вигляді дії оператора еволюції  $\widehat{S}(t)$ :

$$\Psi(x, t) = \widehat{S}(t) \Psi(x, 0), \quad \widehat{S}(0) = 1. \quad (10.16)$$

Для спрощення запису будемо позначати  $\Psi(x, 0) = \Psi(x)$ . Якщо підставити (10.16) у рівняння Шредінгера (10.1), то отримаємо рівняння для  $\widehat{S}(t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{S}}{\partial t} = \widehat{H} \widehat{S}. \quad (10.17)$$

У стаціонарному випадку (при  $\frac{\partial \widehat{H}}{\partial t} = 0$ ) знаходимо розв'язок (10.17)

$$\widehat{S}(t) = e^{-i \frac{\widehat{H}t}{\hbar}}. \quad (10.18)$$

Легко впевнитись, що оператор (10.18) є *унітарним* і для нього  $\widehat{S}^+ = \widehat{S}^{-1}$ .

Для цього досить записати вираз для розкладу оператора  $\widehat{S}^+$  у ряд

$$\widehat{S}^+(t) = \left\{ \exp \left( -i \frac{\widehat{H}t}{\hbar} \right) \right\}^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{it}{\hbar} \right)^n (\widehat{H}^n)^+ \quad (10.19)$$

та обчислити  $(\widehat{H}^n)^+ = (\widehat{H}^+)^n = (\widehat{H})^n$ , беручи до уваги, що для ермітових операторів справедлива рівність  $(\widehat{A}\widehat{B}\dots\widehat{F})^+ = \widehat{F}^+ \dots \widehat{B}^+ \widehat{A}^+$ , а оператор Гамільтона є самоспряженим і відповідає умові  $\widehat{H} = \widehat{H}^+$ . Після знаходження суми (10.19) отримуємо вираз

$$\widehat{S}^+(t) = e^{i \frac{\widehat{H}t}{\hbar}} \equiv \widehat{S}^{-1}(t), \quad (10.20)$$

який доводить умову унітарності.

Переконаємось, що з умови унітарності випливає виконання умови збереження повної ймовірності зі зміною часу

$$\int |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (10.21)$$

Якщо розкласти  $\Psi(x, 0)$  у ряд за власними функціями  $\Psi_\beta(x)$  стаціонарного оператора Гамільтона  $\Psi(x) = \sum_\beta c_\beta \Psi_\beta(x)$ , то, використовуючи (10.16), можна знайти  $\Psi(x, t)$  у довільний момент часу:

$$\Psi(x, t) = \hat{S}(t)\Psi(x) = \sum_\alpha c_\alpha e^{-i\frac{E_\alpha t}{\hbar}} \Psi_\alpha(x). \quad (10.22)$$

Такий метод опису квантово-механічної системи, коли хвильова функція залежить від часу, а всі оператори, включаючи оператор Гамільтона, є стаціонарними, називається *представленням Шредінгера*. У цьому випадку, наприклад, середнє значення будь-якої фізичної величини, представлені стаціонарним оператором  $\hat{A}$ , є нестаціонарним і визначається виразом

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha\beta} e^{i\frac{E_\alpha - E_\beta}{\hbar} t} c_\alpha^* A_{\alpha\beta} c_\beta. \quad (10.23)$$

## 10.4. Представлення Гейзенберга

У *представленні Гейзенберга*, на противагу представленню Шредінгера, хвильові функції не залежать від часу, а оператори – однозначно залежать. Вигляд хвильової функції в цьому представленні знаходимо з (10.16)

$$\Psi(x) = \hat{S}^{-1}(t)\Psi(x, t) = \hat{S}^+(t)\Psi(x, t). \quad (10.24)$$

Для визначення в цьому представленні явного виду довільного оператора  $\hat{A}_{\text{Гейз}}(t)$ , який у представленні Шредінгера був стаціонарним  $\hat{A}_{\text{Шред}}$ , використаємо правило визначення середніх величин

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int \Psi^*(x, t) \hat{A}_{\text{Шред}} \Psi(x, t) dx = \\ &= \int (\hat{S}^+(t)\Psi^*(x)) \hat{A}_{\text{Шред}} (\hat{S}(t)\Psi(x)) dx = \int \{\hat{A}_{\text{Шред}} \hat{S}(t)\Psi(x)\} \{\hat{S}^+(t)\Psi^*(x)\} dx. \end{aligned}$$

Використовуючи умову самоспряженості відносно оператора  $\hat{S}^+(t)$ , отримаємо

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(x) \{\hat{S}^+(t) \hat{A}_{\text{Шред}} \hat{S}(t)\} \Psi(x) dx = \int \Psi^*(x) \hat{A}_{\text{Гейз}}(t) \Psi(x) dx. \quad (10.25)$$

У цьому виразі вводиться новий оператор

$$\hat{A}_{\text{Гейз}}(t) \equiv \hat{S}^+(t) \hat{A}_{\text{Шред}} \hat{S}(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A}_{\text{Шред}} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}, \quad (10.26)$$

який залежить від часу. Рівняння руху цього оператора знаходимо при безпосередньому диференціюванні (10.26), воно має такий вигляд:

$$\frac{d\hat{A}_{\text{Гейз}}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_{\text{Шред}}(t) \hat{H}]. \quad (10.27)$$

## 10.5. Представлення взаємодії

У деяких випадках ефективно використовувати комбіноване представлення, у якому частина залежності від часу переноситься на хвильову функцію, а частина – на оператор. Такі випадки стосуються фізичних систем, у яких повний нестаціонарний оператор Гамільтона

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (10.28)$$

доцільно розділити  $\hat{S}(t)$  на дві частини. У цьому випадку можна вибрати оператор еволюції у вигляді залежності

$$\hat{S}(t) = \hat{\sigma}(t) \hat{S}_0(t), \quad \hat{S}_0(t) = e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}. \quad (10.29)$$

Повна хвильова функція системи має вигляд

$$\Psi(x, t) = \hat{S}_0(t) \Psi_{\text{вз}}(x), \quad \Psi_{\text{вз}}(x, t) = \hat{\sigma}(t) \Psi(x). \quad (10.30)$$

Підставляючи (10.29) у рівняння (10.17), отримуємо рівняння руху для додаткового оператора  $\hat{\sigma}(t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\sigma}(t)}{\partial t} = \hat{V}(t) \hat{\sigma}(t), \quad (10.31)$$

де

$$\hat{V}(t) = \hat{S}_0^+ \hat{V} \hat{S}_0 = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{V} e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}. \quad (10.32)$$

Відповідно, підставляючи повну хвильову функцію системи (10.30) у нестаціонарне рівняння Шредінгера (10.1), приходимо до рівняння для функції  $\Psi_{\text{вз}}(x, t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\text{вз}}(x, t)}{\partial t} = \hat{V}(x, t) \Psi_{\text{вз}}(x, t). \quad (10.33)$$

Розглянуте *представлення взаємодії* успішно використовується при розгляді таких задач, коли базова складова  $\hat{H}_0$  повного оператора Гамільтона (10.28) описує систему, властивості якої (хвильову функції і власні значення енергії) відомі, а складова  $\hat{V}$  описує додатковий вплив на систему.

## 10.6. Представлення вторинного квантування (представлення чисел заповнення)

Розглянуті методи теорії представлень стосуються такого підходу до розв'язку конкретних задач, коли незалежними змінними є такі фізичні величини, як координата, імпульс, енергія тощо. Результатом розв'язання задач за допомогою конкретного представлення є власні функції та власні значення різних операторів.

У деяких випадках (напр., для гармонічного осцилятора, який характеризується еквідистантним спектром рівнів енергії) доцільно переходити до змінної, яка відповідає номеру найвищого заповненого рівня (тобто кількості заповнених рівнів) еквідистантного спектра. Таке представлення називають *представленням вторинного квантування*, або *представленням чисел заповнення*. Такий термін можна пояснити тим, що в цьому випадку задача "первинного" квантування (тобто визначення самого спектра рівнів енергії конкретної системи) вважається розв'язаною, а проблема полягає в аналізі та обчисленні переходів між цими рівнями залежно від особливостей конкретної системи. Це представлення має широке застосування, оскільки модель гармонічного осцилятора відповідає великій кількості важливих фізичних задач, наприклад, задачі квантованого електромагнітного поля, оператор Гамільтона якого після певних перепозначень зводиться до оператора Гамільтона гармонічного осцилятора.

Розглянемо метод введення представлення вторинного квантування на прикладі гармонічного осцилятора. Рівняння Шредінгера для такої системи:

$$\left( \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2} \right) \Psi(x) = E\Psi(x), \quad (10.34)$$

після введення допоміжних параметрів  $x_0 = \sqrt{\hbar/\mu\omega}$  та  $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$  і заміни оператора координати та імпульсу на безрозмірні аналоги

$$\xi = x/x_0, \quad \hat{p}_\xi = \frac{\hat{p}_x}{\sqrt{\mu\hbar\omega}} = -i \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (10.35)$$

приводиться до безрозмірного вигляду (4.10):

$$-\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi^2\Psi(\xi) = \varepsilon\Psi(\xi). \quad (10.36)$$

Розв'язками цього рівняння є власні функції (4.24):

$$\Psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad C_n = \frac{1}{\sqrt{x_0 n! 2^n \sqrt{\pi}}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (10.37)$$

Поліноми Ерміта задовольняють рекурентні співвідношення

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi), \quad (10.38)$$

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi). \quad (10.39)$$

Якщо взяти похідну від функції (10.37) і врахувати (10.39), а також структуру коефіцієнта  $C_n$  (10.37), то отримуємо ланцюжок перетворень

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_n(\xi)}{d\xi} &= -\xi C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} + \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} C_n e^{-\xi^2/2} = \\ &= -\xi \Psi_n(\xi) + 2n C_n H_{n-1}(\xi) e^{-\xi^2/2}. \end{aligned} \quad (10.40)$$

Зробимо два різних перетворення останнього виразу на (10.40). Із (10.37) випливає, що  $C_n = \sqrt{1/2n} C_{n-1}$ . Після такої заміни з (10.40) отримуємо рівняння

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_n(\xi) = \sqrt{n} \Psi_{n-1}(\xi). \quad (10.41)$$

Інше перетворення відповідає заміні в цьому виразі комбінації  $nH_{n-1}(\xi)$  на вираз  $nH_{n-1}(\xi) = \xi H_n(\xi) - H_{n+1}(\xi)/2$ , який випливає з рекурентного співвідношення (10.38):

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_n(\xi)}{d\xi} &= -\xi \Psi_n(\xi) + 2C_n \xi H_{n-1}(\xi) e^{-\xi^2/2} - C_n H_{n+1}(\xi) e^{-\xi^2/2} = \\ &= \xi \Psi_n(\xi) - \sqrt{2(n+1)} \Psi_{n+1}(\xi). \end{aligned} \quad (10.42)$$

Із (10.42) отримуємо рівняння



$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_n(\xi) = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}(\xi). \quad (10.43)$$

Якщо ввести два нових оператори

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi + i\hat{p}_\xi), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi - i\hat{p}_\xi), \quad (10.44)$$

то рівняння (10.41) і (10.43) можна записати у вигляді

$$\hat{a}\Psi_n(\xi) = \sqrt{n}\Psi_{n-1}(\xi), \quad \hat{a}^+\Psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}(\xi). \quad (10.45)$$

Оператор  $\hat{a}$ , діючи на функцію, зменшує на один ступінь збудження системи й називається *оператором знищення*. Оператор  $\hat{a}^+$  навпаки, збільшує на один ступінь збудження системи й називається *оператором породження*.

За допомогою оператора  $\hat{a}^+$  можна отримати будь-який стан системи

$$\begin{aligned} \Psi_{n+1}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ \Psi_n(\xi) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} \hat{a}^+ \hat{a}^+ \Psi_{n-1}(\xi) = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n \Psi_0(\xi). \end{aligned} \quad (10.46)$$

Функцію  $\Psi_0(\xi)$  можна знайти, якщо врахувати особливість дії на неї оператора знищення

$$\hat{a}\Psi_0(\xi) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi) = 0. \quad (10.47)$$

Із цього рівняння знаходимо

$$\Psi_0(\xi) = C_0 e^{-\xi^2/2}. \quad (10.48)$$

При послідовній дії операторів маємо

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}^+\Psi_n(\xi) &= \sqrt{n+1}\hat{a}\Psi_{n+1}(\xi) = (n+1)\Psi_n(\xi), \\ \hat{a}^+\hat{a}\Psi_n(\xi) &= \sqrt{n}\hat{a}^+\Psi_{n-1}(\xi) = n\Psi_n(\xi), \end{aligned} \quad (10.49)$$

що відповідає їх комутатору

$$[\hat{a}\hat{a}^+] = 1. \quad (10.50)$$

Оператор

$$\hat{a}^+\hat{a} = \hat{n} \quad (10.51)$$

є оператором ступеня збудження.

Якщо кожний ступінь розглядати як одну частинку, то  $\hat{n}$  є *оператором кількості частинок*. Наприклад, у лазерній моді, яка за своїми властивостями, відповідає гармонічному осцилятору із взаємним перетворенням електричної та магнітної компонент електромагнітного поля. У такій моді може перебувати довільна кількість фотонів, кожний з яких відповідає збільшенню ступеня збудження моди на одиницю (а енергії моди – на величину  $\hbar\omega$ ).

Якщо знайти зі співвідношення (10.44) оператори координати та імпульсу

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad \hat{p}_\xi = -i(\hat{a} - \hat{a}^+), \quad (10.52)$$

то можна записати оператор Гамільтона для осцилятора в представленні вторинного квантування (у представленні чисел заповнення)

$$\hat{H} = \hat{p}_\xi^2 + \xi^2 = \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} = 2\hat{a}^+\hat{a} + 1 = 2\hat{n} + 1. \quad (10.53)$$

Враховуючи (10.36) і (10.45), а також беручи до уваги співвідношення  $\varepsilon = 2E/\hbar\omega$ , отримуємо стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)\Psi_n(\xi) = E_n\Psi_n(\xi), \quad (10.54)$$

власні значення енергії якого дорівнюють  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ .

Окрім представлення операторів  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^+$  і  $\hat{n}$  у координатно-імпульсній (10.44) і функціональній (10.45) формах, їх можна представити також у формі матриць

$$\begin{aligned} \hat{a} &= \{a_{nm}\}; \quad a_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(\xi) \hat{a} \Psi_m(\xi) d\xi = \sqrt{m} \delta_{n,m-1}, \\ \hat{a}^+ &= \{a_{nm}^+\}; \quad a_{nm}^+ = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(\xi) \hat{a}^+ \Psi_m(\xi) d\xi = \sqrt{m+1} \delta_{n,m+1}. \end{aligned} \quad (10.55)$$

У розгорнутому вигляді ці матриці мають такий вигляд:

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & \dots \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix};$$

$$\hat{a}^+ = \begin{pmatrix} a_{00}^+ & a_{01}^+ & a_{02}^+ & \dots \\ a_{10}^+ & a_{11}^+ & a_{12}^+ & \dots \\ a_{20}^+ & a_{21}^+ & a_{22}^+ & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}; \quad (10.56)$$

$$\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}.$$

**Контрольні запитання**

1. Чим відрізняється представлення Шредінгера від представлення Гейзенберга та представлення взаємодії?
2. Яким чином, знаючи хвильову функцію в представленні вторинного квантування в  $n$ -му стані, можна знайти хвильову функцію в  $m$ -му стані?
3. Довести ермітовість операторів народження та знищення в матричній формі.

**Література:** [1], § 38–45; [2], § 18.

**Розділ V****СПІН І СПІН-ЗАЛЕЖНІ ПРОЦЕСИ  
У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ****§ 11. Передумови введення,  
модель і оператор спіну електрона**

Особливості руху електрона в атомних системах добре узгоджуються з результатами експериментів (в основному з дослідженням атомних спектрів). Водночас існують певні особливості спектрів, які неможливо пояснити на основі моделі атома, що містить лише три інтеграли руху – енергію, момент імпульсу та одну з його проекцій. Ця проблема виникла в 1925 р. при створенні квантової механіки й на основі її аналізу були зроблені висновки про необхідність введення нових, невідомих раніше характеристик частинок. Розглянемо деякі з базових експериментів, які дали підставу для введення спіну електрона.

**11.1. Експериментальні передумови введення спіну**

**11.1.1. Експеримент Штерна – Герлаха.** В експерименті досліджувалось проходження пучка атомів водню, які перебували в основному стані, через область з неоднорідним магнітним полем  $\vec{H}(z)$

(рис. 11.1). Спочатку результати цього експерименту розглядалися з того положення, що магнітний момент атома  $\vec{M}$  пов'язаний з орбітальним рухом електронів. Для атома водню орбітальний магнітний момент описується виразом

$$M_z = -M_B m; \quad M_B = \frac{e\hbar}{2\mu c}, \quad m = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l. \quad (11.1)$$

Енергія взаємодії цього моменту з магнітним полем і сила, яка діє на магнітний момент, визначаються формулами

$$W_{\vec{M}\vec{H}} = -(\vec{H}\vec{M}) = m \frac{e\hbar H}{2\mu c}, \quad (11.2)$$

$$\vec{F} = -\nabla W_{\vec{M}\vec{H}} = F_z \vec{e}_z, \quad F_z = -m \frac{e\hbar}{2\mu c} \frac{\partial H}{\partial z}. \quad (11.3)$$

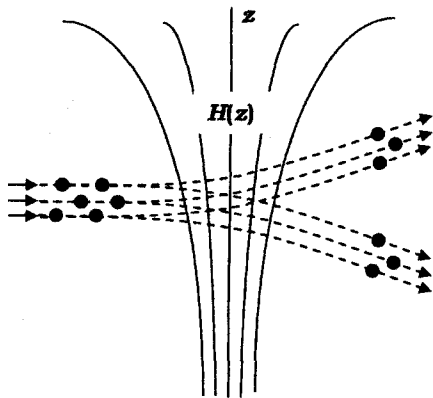


Рис. 11.1. Розщеплення пучка атомів водню в основному стані при їх прольоті через неоднорідне магнітне поле

Оскільки в експерименті використовувався потік атомів водню в 1s-стані, тобто основному, для якого  $m = 0$ , то для кожного з атомів орбітальний магнітний момент (11.1) дорівнює нулю. Логічно було б очікувати, якщо  $\vec{F} = 0$ , то потік атомів не реагуватиме на поле й рухатиметься крізь область неоднорідного поля по прямій лінії. Однак у експерименті спостерігалось розщеплення пучка, причому з аналізу величини розщеплення випливало, що в 1s-стані магнітний момент атома був відмінним від нуля, а його проекції на вісь квантування дорівнювали  $M_z = \pm M_B$ , де  $M_B = e\hbar/2\mu c \approx 0,9 \cdot 10^{-20}$  ерг/Е – магнетон Бора.

Цей результат можна пояснити, якщо припустити, що електрон має власний магнітний момент  $\vec{M}_s$ , проекція якого дорівнює  $M_{sz} = \pm M_B$ .

### 11.1.2. Особливості тонкого розщеплення спектра натрію.

Детальне дослідження структури оптичних переходів у водневоподібних атомах (зокрема переходи валентного електрона в атомі Na з 2p- у 1s-стан) показали, що ці переходи є дублетами і складаються з двох близько розташованих спектральних ліній. В атомі Na це переходи з довжинами хвиль  $\lambda = 5895,93 \text{ \AA}$  та  $\lambda = 5889,96 \text{ \AA}$  (рис. 11.2). Така структура переходів (але з невеликою зміною довжини хвилі) спостерігалась і при накладанні слабкого магнітного поля. Ці результати не узгоджуються з теорією.

Якщо виходити зі структури рівнів водневоподібних атомів з урахуванням можливого розщеплення в магнітному полі, то видно, що перехід між 2p- і 1s-станами водневоподібних атомів може відповідати або одиночній лінії (синглету), або потрійній лінії (триплету).

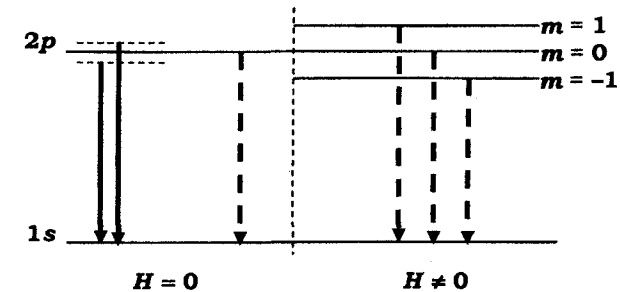


Рис. 11.2. Очікуваний спектр переходів між 2p- і 1s-станами водневоподібних атомів за відсутності та наявності магнітного поля (штрихові лінії) та експериментальний спектр (неперервні лінії)

Наявність дублетів можна обґрунтувати тільки тоді, якщо вважати, що атомний електрон має власний магнітний момент  $\vec{M}_s$ , який взаємодіє з магнітним полем, що у стані 2p створюється внаслідок орбітального руху цього електрона.

**11.1.3. Експеримент Ейнштейна – де Гааса.** Експеримент полягав у дослідженні гіромагнітного співвідношення для циліндра, виготовленого з магнітного матеріалу й підвішеного на пружній нитці (рис. 11.3).

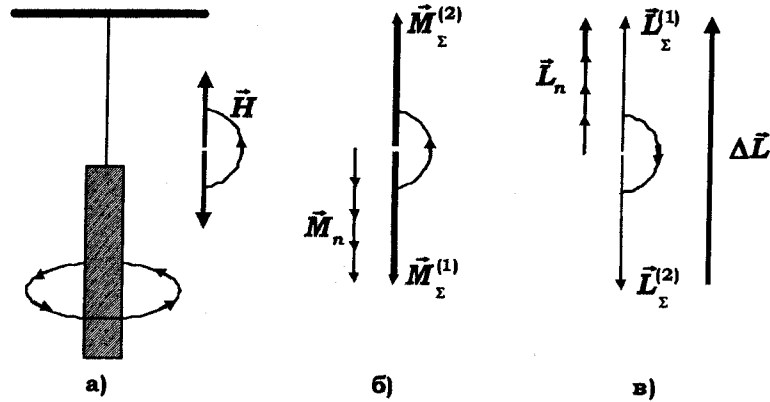


Рис. 11.3. Схема експерименту Ейнштейна – де Гааса (а) і зміна напрямку сумарного магнітного  $\vec{M}_\Sigma^{(1)} \rightarrow \vec{M}_\Sigma^{(2)}$  (б) і механічного  $\vec{L}_\Sigma^{(1)} \rightarrow \vec{L}_\Sigma^{(2)} + \Delta\vec{L}$  (в)

моментів магнітного циліндра при зміні напрямку постійного магнітного поля  $\vec{H}$

Кожний із атомів магнітного матеріалу має магнітний момент. При накладанні дуже сильного магнітного поля  $\vec{H}$  усі елементарні магнітні моменти повертаються й орієнтуються в напрямку цього поля, що веде до утворення сумарного моменту  $\vec{M}_\Sigma^{(1)} = \sum_{n=1}^N \vec{M}_n = N\vec{M}_n$ . При зміні напрямку магнітного поля на протилежний магнітні моменти також повертаються й  $\vec{M}_\Sigma^{(1)} \rightarrow \vec{M}_\Sigma^{(2)}$ . Зміну магнітного моменту  $\Delta\vec{M}$  легко виміряти і ця величина визначає  $|\Delta\vec{M}| = |\vec{M}_\Sigma^{(1)} - \vec{M}_\Sigma^{(2)}| = 2|\vec{M}_\Sigma^{(1)}| = 2N|\vec{M}_n|$ .

Оскільки з кожним магнітним моментом  $\vec{M}_n$  нерозривно пов'язаний механічний момент імпульсу  $\vec{L}_n$ , то синхронно з поворотом повного магнітного моменту розвертається й повний момент імпульсу  $\vec{L}_\Sigma^{(1)} \rightarrow \vec{L}_\Sigma^{(2)}$ . Виконання закону збереження цього моменту приводить до того, що сам циліндр починає обертатися, як єдиний об'єкт з моментом імпульсу  $\Delta\vec{L} = \vec{L}_\Sigma^{(1)} - \vec{L}_\Sigma^{(2)}$ , для якого  $|\Delta\vec{L}| = 2|\vec{L}_\Sigma^{(1)}| = 2N|\vec{L}_n|$ . Це обертання гальмується дією пружного підвісу, але воно легко вимірюється. В експерименті це робилось за допомогою періодичної зміни напрямку магнітного поля. Частота цієї зміни вибиралась рівною частоті власних обертальних коливань циліндра на пружній нитці. Після цього легко знаходимо гіромагнітне співвідношення.

Раніше вважалося, що причиною прояву магнітних властивостей є орбітальний рух електронів. Якщо прийняти це твердження, то можна було б очікувати, що гіромагнітне співвідношення буде збігатися з виразом (8.50) для орбітальних моментів.

Аналіз експерименту показав, що гіромагнітне співвідношення дорівнює

$$\vec{M}_n = -\frac{e}{\mu c} \vec{L}_n, \quad (11.4)$$

що за абсолютною величиною у два рази перевищує гіромагнітне співвідношення (8.50) для орбітальних моментів.

## 11.2. Гіпотеза та початкова модель спіну електрона

У 1925 р. молоді голландські вчені Дж. Уленбек і С. Гаудсміт, аналізуючи наведені вище експериментальні результати, висунули гіпотезу про те, що ці експерименти можна пояснити, якщо припустити наявність у електрона власного механічного моменту (власного моменту імпульсу)  $\vec{S}$ . Цей момент пов'язаний згідно з їх початковим припущенням з обертанням електрона як носія маси навколо осі. Даний власний момент В. Паулі в 1927 р. назвав *спіном* (термін походить від дієслова *to spin*, що означає *крутитися* або *обертатися* або від *spin*, що означає *вертено*). Для появи такого моменту радіус електрона має бути відмінним від нуля. Оскільки обертання електрона як носія заряду навколо осі одночасно приводить до появи азимутального електричного струму, то можна було б очікувати, що із цим власним орбітальним моментом пов'язаний власний магнітний момент  $\vec{M}_s$ , величина якого  $|M_s| = M_B$  була виміряна в експерименті й виявилась рівною магнетону Бора  $M_B = e\hbar/2\mu c$ . Припускаючи, що правила просторового квантування цього гіпотетичного моменту

$$S = \hbar\sqrt{l_s(l_s+1)}, S_z = m_s\hbar, m_s = -l_s, -l_s+1, -l_s+2, \dots, l_s \quad (11.5)$$

такі самі, як у орбітального моменту  $\vec{L}$ , можна очікувати, що загальна кількість проєкцій  $S_z$  дорівнює  $2l_s+1$ . Прирівнюючи цю величину до 2, що відповідає кількості проєкцій  $\vec{M}_s$ , приходимо до висновку:

$$l_s = 1/2, S_z = m_s\hbar = \pm\hbar/2, \text{ а } m_s = \pm 1/2. \quad (11.6)$$

У теорії вперше виникли півцілі квантові числа. Із цих даних випливав вираз для гіромагнітного співвідношення власного магнітного та механічного моментів

$$M_{sz} = g_s S_z, \quad g_s = -\frac{e}{\mu c}, \quad (11.7)$$

яке виявилось у два рази більшим, ніж у орбітальних моментів. Цей результат збігається зі співвідношенням (11.4), яке було отримано в експерименті, і доводить, що магнітні характеристики атомів визначаються не орбітальним рухом атомних електронів, а їх спіном.

Цікаво зауважити, що аналогічна гіпотеза про існування класичної моделі власного механічного моменту, пов'язаної з його обертанням навколо осі, була висунута раніше Р. Кронігом, але він відмовився від неї під впливом критики В. Паулі та В. Гейзенберга. Уленбек і Гаудсміт про це не знали. Вони виклали цю гіпотезу разом з аналізом експерименту О. Штерна й В. Герлаха та відправили рукопис статті до журналу. Водночас вони надіслали копію рукопису Паулі. Той відповів, що це хибна модель, оскільки для її реалізації необхідно, щоб лінійна швидкість обертання поверхні електрона навколо осі перевищувала швидкість світла. Уленбек і Гаудсміт, отримавши таку негативну відповідь від Паулі, спробували відкликати свій рукопис, але це виявилось неможливим, тому що журнал вже друкувався. І хоча представлення про спін як про класичну електронну дзигу виявилось хибним, сама ідея спіну як невід'ємної характеристики електрона була вірною.

Сучасне представлення про спін електрона, а також про власний магнітний момент базуються на рівнянні Дірака, яке розглядатиметься далі. Випереджаючи аналіз рівняння Дірака слід зауважити, що власний магнітний момент  $\vec{M}_s$  не є константою, а його збіг з магнетонном Бора існує лише в нерелятивістському випадку, тобто за відносно малої швидкості частинок  $v \ll c$ . Для випадку дуже високих швидкостей  $v \rightarrow c$  величина  $\vec{M}_s$  монотонно спадає. Ці результати повністю підтверджуються експериментами з використанням прискорених електронів. Водночас власний механічний момент (спін)  $\vec{S}$  є константою і його величина не залежить від швидкості частинки.

### 11.3. Оператор спіну електрона

Для введення спіну як фізичної величини в апарат квантової механіки необхідно побудувати оператор власного механічного моменту імпульсу (тобто спіну)  $\hat{S}$ . Усі проекції будь-якого механічного моменту (незалежно від причини їх виникнення) задовольняють комутаційні співвідношення

$$\hat{S}_i \hat{S}_j - \hat{S}_j \hat{S}_i = i\hbar \hat{S}_k, \quad (11.8)$$

у яких індекси утворюють послідовний цикл перестановок  $i, j, k \Rightarrow xyz, yzx, zxy$ .

Якщо перейти до безрозмірних операторів  $\hat{S}_i = (\hbar/2)\hat{\sigma}_i$ , то з (11.8) можна отримати систему

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y - \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = 2i\hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = 2i\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 2i\hat{\sigma}_y. \end{cases} \quad (11.9)$$

У цій системі два операторних рівняння є незалежними, а будь-яке третє можна отримати з двох інших.

У розглянутій теорії представлень показано, що найбільш універсальним видом оператора є представлення його в матричній формі. Ранг цієї матриці може бути визначений на основі аналізу експериментів і з урахуванням правила визначення власних функцій і власних значень оператора, заданих у матричній формі. У (9.32) і (9.33) було показано, що кількість власних значень дорівнює рангу матриці. Експерименти показали, що існують два власних значення.

Таким чином, можна шукати оператори  $\hat{S}_i$  та  $\hat{\sigma}_i$  у вигляді матриць

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}. \quad (11.10)$$

Якщо підставити ці матриці в (11.9), то замість системи з трьох матричних рівнянь (11.9) матимемо систему з 12 звичайних рівнянь для визначення кожної з компонент матриці. Оскільки в (11.9) лише два рівняння є незалежними, то після такої підстановки буде 8 незалежних рівнянь, що недостатньо для визначення всіх 12 компонент. Їх потрібно знайти з інших умов.

Згадаємо правило (9.17), згідно з яким у власному представленні будь-який оператор зображується діагональною матрицею. Іншими словами, завжди є таке представлення, яке приводить один з операторів до діагональної матриці.

Будемо проводити подальший аналіз у представленні, у якому матриця  $\hat{\sigma}_z$  має діагональний вигляд

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} c_{11} & 0 \\ 0 & c_{22} \end{pmatrix}. \quad (11.11)$$

Це представлення називається  $\hat{S}_z$ -представленням і характерне тим, що в ньому за основу розрахунків береться саме  $z$ -та проекція оператора спіну.

Ще дві компоненти (11.10) можна знайти, якщо використати власні значення  $S_z = \pm\hbar/2$ , які знайдено з аналізу експерименту Штерна – Герлаха. Цим величинам відповідають власні значення оператора (11.11)  $\sigma_z = \pm 1$ .

Якщо згадати, що власні значення оператора в матричному представленні обчислюються з рівняння (10.33), то можна записати аналогічне рівняння для оператора (11.11):

$$\begin{pmatrix} c_{11} - \sigma_z & 0 \\ 0 & c_{22} - \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} - 1 & 0 \\ 0 & c_{22} + 1 \end{pmatrix} = 0. \quad (11.12)$$

Із цього рівняння знаходимо  $c_{11} = 1$ ,  $c_{22} = -1$  та остаточний вигляд  $\hat{\sigma}_z$ :

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.13)$$

Підставляючи (11.13) по черзі в друге, третє, а потім у перше рівняння системи (11.9) і прирівнюючи відповідні матричні елементи, отримуємо систему результатів

$$a_{11} = a_{22} = 0, \quad a_{12} = a_{21}^* = e^{i\varphi}, \quad b_{11} = b_{22} = 0, \quad b_{12} = b_{21}^* = -ia_{12}. \quad (11.14)$$

У (11.14)  $\varphi$  – довільна дійсна фаза. Якщо покласти  $\varphi = 0$ , то матричні оператори  $\hat{\sigma}_i$  і компоненти оператора спіну набувають остаточного вигляду

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (11.15)$$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.16)$$

Оператори  $\hat{\sigma}_i$ , задані у вигляді (11.15), називають *матрицями Паулі*. Використовуючи (11.15) і (11.16), легко знайти вигляд більш складних операторів, які залежать від спіну. Зокрема оператор квадрата спіну має вигляд

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3\hbar^2}{4} \hat{I}. \quad (11.17)$$

У (10.17) величина  $\hat{I}$  є одиничною матрицею.

З урахуванням спіну, як додаткової характеристики, яка набуває двох значень, будь-яку хвильову функцію частинки зі спіном можна представити, як набір з двох функцій  $\Psi_{1,2}(\vec{r}, t, S_z = \pm\hbar/2)$  і записати у вигляді матриці

$$\Psi(\vec{r}, t, S_z = \pm\frac{\hbar}{2}) = \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Таку двокомпонентну хвильову функцію називають *спінором*. Спряжена функція має вигляд

$$\Psi^+(\vec{r}, t, S_z = \pm\frac{\hbar}{2}) = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv (\Psi_1^* \ \Psi_2^*). \quad (11.19)$$

Така форма зображення хвильової функції дозволяє робити компактний запис отриманих раніше співвідношень для середніх значень величин у матричному представленні (9.26):

$$\langle L(\vec{r}, t) \rangle = \sum_{\alpha, \beta} c_{\alpha}^*(\vec{r}, t) L_{\alpha\beta} c_{\beta}(\vec{r}, t) \equiv \sum_{\alpha, \beta} \Psi_{\alpha}^*(\vec{r}, t) L_{\alpha\beta} \Psi_{\beta}(\vec{r}, t).$$

Переконаємось, що цей вираз можна записати у формалізованому вигляді

$$\begin{aligned} \langle L(\vec{r}, t) \rangle &= \Psi^*(\vec{r}, t, S_z) \hat{L} \Psi(\vec{r}, t, S_z) \equiv \\ &\equiv \begin{pmatrix} \Psi_1^*(\vec{r}, t) & \Psi_2^*(\vec{r}, t) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) & 0 \\ \Psi_2(\vec{r}, t) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.20)$$

Наприклад, середні значення кожної з трьох проекцій спіну визначаються виразами:

$$\langle S_x \rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_2^* \Psi_1), \quad (11.21)$$

$$\langle S_y \rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = i\frac{\hbar}{2} (\Psi_2^* \Psi_1 - \Psi_1^* \Psi_2), \quad (11.22)$$

$$\langle S_z \rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1^* & \Psi_2^* \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|\Psi_1|^2 - |\Psi_2|^2). \quad (11.23)$$

Враховуючи гіромагнітне співвідношення, можна записати оператор власного магнітного моменту у вигляді формули

$$\hat{M}_s = -\frac{e}{\mu c} \hat{S}. \quad (11.24)$$

яка є узагальненням (11.7). Цей вираз буде використовуватися далі.

**Контрольні запитання**

1. Чи є оператор спіну ермітовим?
2. Який тип магнітних моментів (орбітальний чи спіновий) відповідає за явище феромагнетизму?
3. Як зміниться гіромагнітне співвідношення для спінових моментів електрона при збільшенні його кінетичної енергії?

**Література:** [1], § 58–61; [2], § 32; [4], § 54.

## § 12. Хвильове рівняння для електрона з урахуванням спіну та за наявності електромагнітного поля

### 12.1. Рівняння Паулі

Розглянемо метод опису стану електрона в силовому полі за наявності зовнішнього електромагнітного поля та врахуванні його спіну. Електромагнітне поле можна представити через скалярний  $\phi(\vec{r})$  і векторний  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  потенціали або через вектори напруженості електричного та магнітного полів

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{H}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{A}. \quad (12.1)$$

В електродинаміці показано, що за наявності електромагнітного поля при побудові функції Гамільтона для частинки з масою  $\mu$  і зарядом  $q$  замість кінематичного імпульсу  $\mu\vec{v} = \vec{p}$  потрібно використовувати вираз для імпульсу

$$\mu\vec{v} = \vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A}.$$

З урахуванням цієї заміни остаточний вираз для оператора Гамільтона за наявності в електроні як маси, так і заряду  $q = -e$  має вигляд

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2}{2\mu} - e\phi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \nabla + \frac{e^2 A^2}{2\mu c^2} - e\phi. \quad (12.2)$$

При отриманні оператора Гамільтона (12.2) використано калібровку потенціалу  $\nabla \vec{A} = 0$ . Отриманий вираз для оператора Гамільтона не враховує наявності спіну та власного магнітного моменту електрона  $\vec{M}_S = -(e/\mu c)\vec{S}$ , який взаємодіє із зовнішнім магнітним полем (12.1):

$$\Delta W_{\vec{M}_S, \vec{H}} = -(\vec{M}_S \vec{H}) = \frac{e}{\mu c} \vec{H} \vec{S} = \frac{e\hbar}{2\mu c} \vec{H} \hat{\sigma}. \quad (12.3)$$

Підставляючи цю енергію в оператор (12.2), отримуємо модифіковане стаціонарне рівняння Шредінгера, яке називають *стаціонарним рівнянням Паулі*:

$$\hat{H}\Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \nabla + \frac{e^2 A^2}{2\mu^2 c^2} + \frac{e\hbar \vec{H}}{2\mu c} \hat{\sigma} - e\phi \right) \Psi = E\Psi. \quad (12.4)$$

Використовуючи оператор Гамільтона визначаємо вигляд нестационарного рівняння Паулі:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \nabla + \frac{e^2 A^2}{2\mu c^2} + \frac{e\hbar \vec{H}}{2\mu c} \hat{\sigma} - e\phi \right) \Psi. \quad (12.5)$$

Розв'язком обох рівнянь є функція типу (11.18):

$$\Psi(\vec{r}, t, S_z = \pm \hbar/2) = \begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

### 12.2. Рівняння неперервності та вектор густини струму ймовірності за наявності спіну електрона

Виходячи з отриманих співвідношень, отримаємо рівняння неперервності та вираз для вектора густини струму ймовірності за наявності спіну електрона. Для цього спочатку запишемо рівняння (12.4), а також рівняння, спряжене до нього. Потім функцію  $\Psi^+$  (яка розташована зліва) помножимо почленно на кожний із членів першого рів-

няння, а кожний із доданків другого рівняння почленно помножимо на функцію  $\Psi$ , яка при цьому розташована справа.

$$\Psi^+ \left\{ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi - \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \nabla \Psi + \frac{e^2 A^2}{2\mu^2 c^2} \Psi + \frac{e\hbar \vec{H}}{2\mu c} \hat{\sigma} \Psi - e\phi \Psi \right\}, \quad (12.6)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \Psi^+ + \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \nabla \Psi^+ + \frac{e^2 A^2}{2\mu^2 c^2} \Psi^+ + \frac{e\hbar \vec{H}}{2\mu c} (\hat{\sigma} \Psi)^+ - e\phi \Psi^+ | \Psi.$$

Тепер віднімемо друге з отриманих рівнянь від першого, зберігаючи порядок розташування функцій, та отримаємо рівняння

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ \Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \{ \Psi^+ \Delta \Psi - (\Delta \Psi^+) \Psi \} - \frac{ie\hbar}{\mu c} \vec{A} \{ \Psi^+ \nabla \Psi + (\nabla \Psi^+) \Psi \} + \frac{e\hbar \vec{H}}{2\mu c} \{ \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi - (\hat{\sigma} \Psi)^+ \Psi \}. \quad (12.7)$$

Перетворимо останній член цього рівняння, враховуючи, що для ермітових матриць виконується правило  $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$ , у справедливості якого переконуємось прямою підстановкою матриць. Застосовуючи це правило, знаходимо

$$\Psi^+ \hat{\sigma} \Psi - (\hat{\sigma} \Psi)^+ \Psi = \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi - \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi = 0.$$

Враховуючи цей результат, а також використовуючи очевидне правило

$$\nabla (\Psi^+ \nabla \Psi - (\nabla \Psi^+) \Psi) = \Psi^+ \Delta \Psi - (\Delta \Psi^+) \Psi,$$

отримуємо остаточний вираз для (12.7):

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ \Psi + \nabla \left\{ \frac{i\hbar}{2\mu} ((\nabla \Psi^+) \Psi - \Psi^+ \nabla \Psi) + \frac{e}{\mu c} \vec{A} \Psi^+ \Psi \right\} = 0. \quad (12.8)$$

Це співвідношення має вигляд рівняння неперервності  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0$ , у якому

$$\rho = \Psi^+ \Psi = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 \quad (12.9)$$

є густиною ймовірності просторової локалізації електрона з будь-якою орієнтацією спіну в даному місці, а величина

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2\mu} \{ (\nabla \Psi^+) \Psi - \Psi^+ \nabla \Psi \} + \frac{e}{\mu c} \vec{A} \Psi^+ \Psi \quad (12.10)$$

відповідає густині струму ймовірності.

Відповідний вигляд має вектор густини електричного струму

$$\vec{j}_e = -e\vec{j} = -\frac{ie\hbar}{2\mu} \{ (\nabla \Psi^+) \Psi - \Psi^+ \nabla \Psi \} - \frac{e^2}{\mu c} \vec{A} \Psi^+ \Psi. \quad (12.11)$$

В отриманих співвідношеннях відсутні складові, залежні від спіну частинки. Покажемо, що їх треба вводити додатково. Спочатку розглянемо загальні співвідношення електродинаміки між густиною струму та магнітним моментом. Із рівняння Максвелла для напруженості магнітного поля

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{4\pi}{c} \vec{j}_e, \quad \vec{B} = \vec{H} + 4\pi \langle \vec{M} \rangle \quad (12.12)$$

випливає рівняння для індукції

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} (\vec{j}_e + c[\nabla \times \langle \vec{M} \rangle]). \quad (12.13)$$

У цьому рівнянні  $\vec{j}_e$  – вектор густини електричного струму, пов'язаного з рухом зарядів. Другий доданок справа у формулі (12.12)  $\Delta \vec{j}_e = c[\nabla \times \langle \vec{M} \rangle]$  можна тлумачити як додаткову складову вектора густини струму, пов'язану зі зміною в просторі розподілу усередненого за спіновими орієнтаціями магнітного моменту  $\langle \vec{M} \rangle$ . Включаючи цей доданок у вираз для (12.11), отримуємо вираз для вектора повної густини електричного струму

$$\vec{j}_{e(\text{повн})} = \vec{j}_e + \Delta \vec{j}_e = \vec{j}_e + c[\nabla \times \langle \vec{M} \rangle]. \quad (12.14)$$

Якщо використати вираз (11.20) для обчислення середньої величини магнітного моменту

$$\langle \vec{M} \rangle = -\frac{e\hbar}{2\mu c} \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi, \quad (12.15)$$

то вираз для вектора повної густини електричного струму набуває такого вигляду:

$$\vec{j}_{e(\text{повн})} = \vec{j}_e - \frac{e\hbar}{2\mu} [\nabla \times \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi]. \quad (12.16)$$

Аналогічний вираз  $\Delta \vec{j}_e = -(e\hbar/2\mu)[\nabla \times \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi]$  треба додати до (12.15), а вираз  $\vec{j}_e / (-e) = (\hbar/2\mu)[\nabla \times \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi]$  – до (12.9), після чого ці формули набувають остаточного вигляду

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2\mu} ((\nabla \Psi^+) \Psi - \Psi^+ \nabla \Psi) + \frac{e}{\mu c} \vec{A} \Psi^+ \Psi + \frac{\hbar}{2\mu} \nabla \times \Psi^+ \hat{\sigma} \Psi, \quad (12.17)$$



$$\hat{j}_e = -\frac{ie\hbar}{2\mu}((\nabla\Psi^+)\Psi - \Psi^+\nabla\Psi) - \frac{e^2}{\mu c}\bar{A}\Psi^+\Psi - \frac{e\hbar}{2\mu}\nabla\times\Psi^+\hat{\sigma}\Psi. \quad (12.18)$$

Причина, згідно з якою цей доданок треба вводити у формули для густини струму "вручну", пов'язана з тим, що згідно з правилами векторної теорії поля для будь-якого вектора  $\vec{G}$  (у т.ч., і для вектора  $\vec{G} = \Psi^+\hat{\sigma}\Psi$ ) справедлива рівність  $\nabla(\nabla\times\vec{G})\equiv 0$ , і тому цей доданок неможливо було отримати у складі виразу для  $\hat{j}$  із формули (12.8), де він перебуває під знаком  $\nabla$ .

### 12.3. Атомний електрон у помірно сильному магнітному полі. Нормальний ефект Зеемана

Розглянемо вплив однорідного постійного магнітного поля  $\vec{H} = \{0, 0, H\}$  на рух і стан атомного електрона у водневоподібному атомі. Цьому полю відповідає векторний потенціал

$$\vec{A}(\vec{r}) = \{-yH/2, xH/2, 0\}, \quad (12.19)$$

який знаходимо з рівняння (12.1)  $\vec{H}(\vec{r}) = \nabla\times\vec{A}(\vec{r})$ , він відповідає калібровці  $\nabla\vec{A}(\vec{r}) = 0$ .

Підставляючи (12.19) у рівняння Паулі (12.4), отримуємо

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - e\varphi - \frac{ie\hbar H}{\mu c}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) + \frac{e^2 H^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2) + \frac{e\hbar H}{2\mu c}\hat{\sigma}_z\right)\Psi = E\Psi. \quad (12.20)$$

Зробимо деякі спрощувальні заміни в (12.20), враховуючи той фактор, що існуюча тут комбінація координат і похідних відповідає оператору

$$-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \hat{L}_z,$$

а два перших доданки визначають оператор Гамільтона  $\hat{H}_0$  за відсутності поля

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - e\varphi.$$

Використовуючи заміни, приходимо до матричного рівняння для двокомпонентної хвильової функції

$$\left(\hat{H}_0 + \frac{eH}{\mu c}\hat{L}_z + \frac{e^2 H^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2) + \frac{e\hbar H}{2\mu c}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right)\begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \Psi_1 & 0 \\ \Psi_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (12.21)$$

яке можна перетворити на два рівняння для кожної із функцій  $\Psi_{1,2} \equiv \Psi_{1,2}(\vec{r}, S_z = \pm\hbar/2)$ :

$$\left(\hat{H}_0 + \frac{eH}{\mu c}\hat{L}_z + \frac{e^2 H^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2) \pm \frac{e\hbar H}{2\mu c}\right)\Psi_{1,2} = E\Psi_{1,2}. \quad (12.22)$$

Ці два рівняння містять вирази, що мають лінійний і квадратичний внески з боку магнітного поля. Очевидно, що при дуже сильному полі доданок з  $H^2$  буде набагато перевищувати доданок, який пропорційний  $H$ . За слабкого поля маємо протилежне. Із рівності двох останніх доданків у операторі Гамільтона в (12.22) знайдемо критичне магнітне поле

$$H_{\text{кр}} = \frac{4\hbar c}{e(x^2 + y^2)}, \quad (12.23)$$

при якому ці доданки співрозмірні між собою. Якщо використати для оцінки (12.23) середньоквадратичний розмір атома

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\langle y^2 \rangle} = a/\sqrt{3}, \quad (12.24)$$

який у основному стані відповідає радіусу першої борівської орбіти  $a \approx 5 \cdot 10^{-9}$  см, то отримаємо оцінку для величини критичного поля  $H_{\text{кр}} \approx 10^{10}$  Е. Це – надзвичайно сильне поле, яке в земних умовах ніхто ще не отримував, тому можна вважати, що всі поля, з якими можна мати справу на Землі, є слабкими й для них  $H \ll H_{\text{кр}}$ . Виходячи із цієї обставини, будемо нехтувати квадратичним (за величиною поля  $H$ ) доданком у (12.22) та проаналізуємо спрощене рівняння

$$\left(\hat{H}_0 + \frac{eH}{\mu c}\hat{L}_z \pm \frac{e\hbar H}{2\mu c}\right)\Psi_{1,2} = E\Psi_{1,2}. \quad (12.25)$$

Оскільки оператор  $\hat{H}_0$  комутує з оператором  $\hat{L}_z$  (а обидва вони завжди комутують з будь-якою сталою величиною, у т.ч. з  $e\hbar H/2\mu c$ ), то власні функції оператора Гамільтона з рівняння (12.25) збігаються (щодо спільних змінних, тобто координат) із власними функціями  $\Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$  оператора  $\hat{H}_0$ , а відрізнятимуться лише знаком

проекції вектора спіну. Ця обставина показує, що за виконання умови  $H \ll H_{кр}$  наявність магнітного поля не приводить до зміни координатної частини хвильових функцій. Лише при  $H \geq H_{кр}$  відбувається вплив магнітного поля на просторову структуру хвильових функцій. Фізичний зміст такої умови стає очевидним, якщо порівняти силу Лоренца

$$\vec{F}_L = -\frac{e}{c}[\vec{v} \times \vec{H}], \quad (12.26)$$

яка діє на електрон, що рухається в атомі зі швидкістю  $\vec{v}$  у магнітному полі, із силою кулонівського притягування

$$\vec{F}_e = -\frac{e^2 \vec{r}}{r^2} \quad (12.27)$$

цього електрона до ядра. Визначимо, при якому значенні поля  $H_{eL}$  ці сили за абсолютною величиною рівні між собою. Використовуючи для оцінки вирази для швидкості електрона на першій борівській орбіті  $v_1 = e^2 / \hbar$  і для радіуса цієї орбіти  $r_1 = a = \hbar^2 / \mu e^2$ , отримуємо

$$H_{eL} = \frac{\hbar c}{ea^2}. \quad (12.28)$$

Видно, що ця величина близька до оцінки критичного магнітного поля (12.23).

Таким чином, можна зазначити, що за виконання умови  $H \ll H_{кр}$  сила Лоренца, яка діє на електрон у атомі й може змінювати його стан, є значно меншою, ніж сила кулонівського притягування, яка формує звичний розподіл електронних станів.

Підставляючи в (12.25) функції

$$\Psi_{1,2} = \Psi_{nlm}(\vec{r}, S_z = \pm \hbar/2) \quad (12.29)$$

і враховуючи, що

$$\hat{H}_0 \Psi_{nlm}(\vec{r}) = E_n \Psi_{nlm}(\vec{r}), \quad \hat{L}_z \Psi_{nlm}(\vec{r}) = m\hbar \Psi_{nlm}(\vec{r}), \quad (12.30)$$

остаточно отримуємо вираз для рівнів енергії атомного електрона в магнітному полі:

$$E = E_n + (m \pm 1) \frac{e\hbar H}{\mu c}. \quad (12.31)$$

Між рівнями можливі квантові переходи. Якщо врахувати тільки переходи між станами з різними значеннями магнітного квантового числа та однакою орієнтацією спіну (переходи з одночасною зміною

орбітального та квантового числа малоїмовірні), то спектр переходів визначається формулою

$$\omega_{nl,n'l'} = \omega_{n,n'} + (m \pm m') \frac{eH}{\mu c}, \quad \omega_{n,n'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \quad (12.32)$$

і відповідає трьом спектральним лініям. Видно, що спектр переходів буде однаковим для кожної орієнтації спіну. Вигляд відповідного спектра представлено на рис. 12.4.

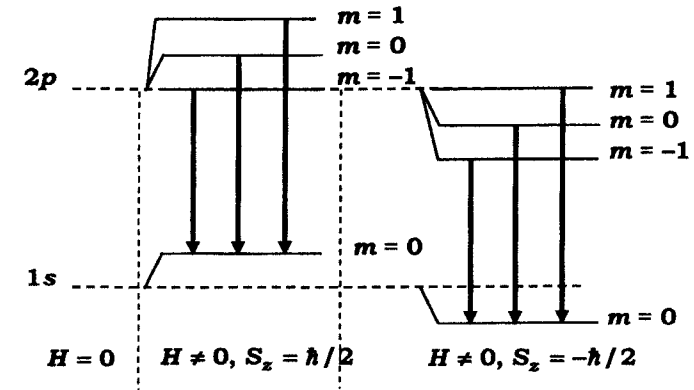


Рис. 12.4. Спектр рівнів енергії для 2p - і 1s-станів і переходи між ними в атомі водню за присутності помірно сильного магнітного поля

Закон розщеплення спектральної лінії (рис. 12.4) залежно від амплітуди однорідного магнітного поля називають *нормальним ефектом Зеемана*. Область його існування обмежена "зверху" величиною  $H \ll H_{кр}$ . Водночас слід зауважити, що ця область також обмежена "знизу" граничним полем  $H_{LS}$ . Причина існування "нижньої" границі буде розглянута далі.

### Контрольні запитання

1. Як впливає векторний потенціал на стан зарядженої частинки без спіну?
2. Який основний механізм впливу гранично сильного електромагнітного поля на електрони та ядра?
3. За яких умов буде справедливим рівняння Паулі?
4. Як впливає наявність спіну в електроні на густину електричного струму електронів?

**Література:** [1], § 61-62; [2], § 67.

## 13. Спін-орбітальний зв'язок у атомах. Симетрія хвильової функції

### 13.1. Спін-орбітальний зв'язок у атомах

При розгляді нормального ефекту Зеемана не була врахована взаємодія власного (спінового) та орбітального магнітних моментів електрона в атомі. Спочатку оцінимо порядок величини такої взаємодії. Було показано, що орбітальний рух електрона еквівалентний кільцевому електричному струму й приводить до появи орбітального магнітного моменту  $\vec{M}_L$ . Цей момент відмінний від нуля для станів з  $m \neq 0$  (у стані  $1s$ , для якого  $m = 0$ , маємо  $M_{Lz} = 0$ ). Він локалізований у центральній частині атома і у віддаленій точці  $\vec{r}$  створює магнітне поле

$$\vec{H} = \frac{3(\vec{M}_L \vec{r})\vec{r}}{r^5} - \frac{\vec{M}_L}{r^3}. \quad (13.1)$$

Енергія взаємодії цього поля зі спіновим магнітним моментом  $\vec{M}_S$  визначається виразом

$$\Delta W_{LS} = -(\vec{H}\vec{M}_S) = m_S \frac{M_B^2}{r^3} (1 - 3 \cos^2 \theta_{LS}), \quad \cos \theta_{LS} = (\vec{e}_z \vec{r})/r. \quad (13.2)$$

Порядок величини цієї енергії для  $2p$ -стану при  $r \approx 4a \approx 2 \text{ \AA}$  визначається виразом

$$\Delta W_{LS} \approx \pm \frac{M_B^2}{r^3} \approx \pm 10^{-15} \text{ ерг}, \quad (13.3)$$

що досить близько до експериментального значення розщеплення рівнів, яке для дублета Na відповідає величині  $\Delta E = 2\Delta W_{LS} \approx 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ ерг}$ .

На жаль, наведений розрахунок має якісний характер і не може бути використаний для знаходження точного значення  $\langle \Delta W_{LS} \rangle$ . Це пов'язано з тим, що формула (13.1) для поля магнітного моменту, який створюється скінченним за розміром контуром з кільцевим струмом, коректна тільки на відстані, що набагато більша за розмір цього контуру, тобто розмір атома. Використання цієї формули для

оцінки поля в межах атома приводить до великих похибок. Слід зауважити, оскільки спіновий магнітний момент електрона не пов'язаний з реальним контуром струму, то для нього формули типу (13.3) будуть справедливими.

Проведемо точний розрахунок, не використовуючи з самого початку поняття про магнітне поле орбітального моменту. Спочатку побудуємо класичний вираз для енергії спін-орбітального зв'язку. В атомі ядро створює електричне поле

$$\vec{E} = -\frac{d\phi}{dr} \frac{\vec{r}}{r} = \frac{1}{e} \frac{dV}{dr} \frac{\vec{r}}{r}, \quad (13.4)$$

яке залежить від потенціалу поля ядра  $\phi$  і потенціальної енергії електрона  $V(r)$ .

У системі координат, яка рухається зі швидкістю електрона  $\vec{v}$ , виникає магнітне поле

$$\vec{H} = \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{E}] = -\frac{1}{rce} \frac{dV}{dr} [\vec{r} \times \vec{v}], \quad (13.5)$$

напруженість якого можна виразити через орбітальний механічний момент електрона  $\vec{L} = \mu[\vec{r} \times \vec{v}]$ :

$$\vec{H} = -\frac{1}{\mu rce} \frac{dV}{dr} \vec{L}. \quad (13.6)$$

Енергія взаємодії спінового магнітного моменту із цим полем визначається виразом  $\Delta W_{LS} = -(\vec{H}\vec{M}_S)$ .

Перейшовши до операторної форми запису величин і враховуючи, що потенціальна енергія електрона в атомі водню або у водневоподібних атомах має вигляд  $V(r) = -Ze^2/r$ , отримуємо

$$\Delta \hat{W}_{LS} = -(\hat{H}\hat{M}_S) = \frac{1}{\mu^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \hat{L}\hat{S} = \frac{Ze^2}{\mu^2 c^2 r^3} \hat{L}\hat{S}. \quad (13.7)$$

Перетворимо скалярний добуток векторів  $\hat{L}\hat{S}$ , вводячи вектор сумарного моменту  $\hat{J}$ :

$$\hat{L} + \hat{S} = \hat{J}. \quad (13.8)$$

Цей момент квантується за загальними правилами. Його власні значення і проекції на вісь квантування визначаються формулами:

$$J^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j = \begin{cases} l+1/2, & \text{якщо } (\vec{S}\vec{L}) > 0, \\ |l-1/2|, & \text{якщо } (\vec{S}\vec{L}) < 0, \end{cases} \quad (13.9)$$

$$J_z = m_j \hbar, \quad m_j = m \pm 1/2, \quad |m_j| \leq j. \quad (13.10)$$

Оскільки величина орбітального квантового числа  $j$  (13.9) для сумарного моменту залежить від орієнтації спіну електрона, то стан електрона в атомі треба характеризувати квантовими числами  $n, l, j, m_j$ , а хвильова функція має вигляд  $\Psi_{n,l,j,m_j}(r, \theta, \phi, S_z)$ .

З означення (13.8) можна знайти модуль вектора сумарного моменту  $\hat{J}$ :

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S} \quad (13.11)$$

і підставити отриману величину  $\hat{L}\hat{S}$  у вираз для оператора енергії взаємодії (13.7):

$$\Delta \hat{W}_{LS} = \frac{Ze^2}{2\mu^2 c^2 r^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2). \quad (13.12)$$

Після усереднення цього виразу знаходимо енергію спин-орбітальної взаємодії

$$\begin{aligned} \langle \Delta W_{LS} \rangle &= \frac{Ze^2 \hbar^2}{2\mu^2 c^2} \int \Psi_{n,l,j,m_j}^* \frac{1}{r^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \Psi_{m,l',j',m_j'} dV = \\ &= \frac{Ze^2}{2\mu^2 c^2} \langle r^{-3} \rangle \{j(j+1) - l(l+1) - l_S(l_S+1)\}. \end{aligned} \quad (13.13)$$

Середнє значення  $\langle r^{-3} \rangle$  можна знайти в загальному вигляді з використанням координатної частини хвильової функції:

$$\begin{aligned} \langle r^{-3} \rangle &\equiv \int \Psi_{n,l,j,m_j}^* \frac{1}{r^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \Psi_{m,l',j',m_j'} dV = \\ &= \frac{Z^3}{a^3 n^3 l(l+1)(l+1/2)}, \end{aligned} \quad (13.14)$$

де  $a = \hbar^2 / \mu e^2$  – борівський радіус.

Враховуючи отриманий результат, знаходимо остаточний вираз для енергії спин-орбітальної взаємодії

$$\langle \Delta W_{LS} \rangle = Ry \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \frac{\{j(j+1) - l(l+1) - 3/4\}}{l(l+1)(l+1/2)}. \quad (13.15)$$

У цьому виразі  $Ry = \mu e^4 / 2\hbar^2 \approx 13,6$  еВ – стала Рідберга, виражена в енергетичних одиницях,  $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$  – стала тонкої структури. Слід зазначити, що приблизно такий самий (за величиною) внесок у енергію рівня електрона

$$\langle \Delta W_{\text{рел}} \rangle = Ry \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \left\{ \frac{3}{4n} - \frac{1}{l+1/2} \right\} \quad (13.16)$$

пов'язаний з релятивістськими ефектами. Ці ефекти будуть детально розглянуті далі, їх поява пов'язана з тим, що стани енергії з різними значеннями орбітального квантового числа характеризуються різними величинами радіальної швидкості електрона.

Вирази для сумарного зсуву рівня  $\langle \Delta W \rangle$  і положення самого рівня енергії  $E_{nj}$  мають вигляд

$$\langle \Delta W \rangle = \langle \Delta W_{LS} \rangle + \langle \Delta W_{\text{рел}} \rangle = Ry \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \left\{ \frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right\}, \quad (13.17)$$

$$E_{nj} = -\frac{Ry}{n^2} + Ry \frac{Z^4 \alpha^2}{n^3} \left\{ \frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right\}. \quad (13.18)$$

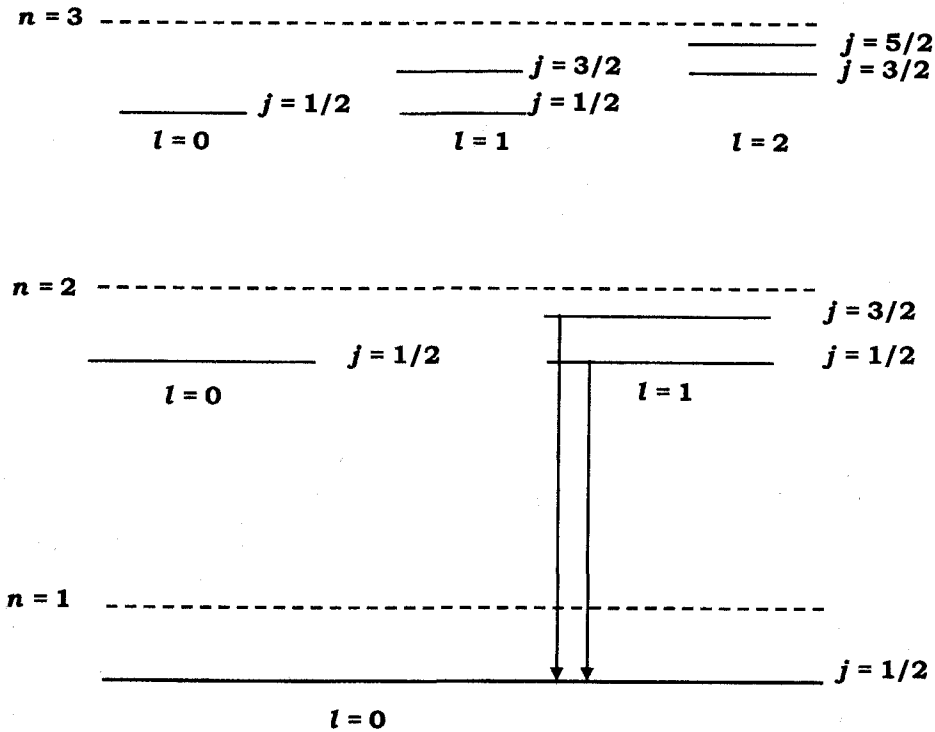
Така деформація спектра приводить до появи тонкої структури. З отриманих формул видно, що сумарна дія спин-орбітальної взаємодії та релятивістських ефектів призводить до часткового зняття виродження енергії рівня. Стани з різними значеннями  $j = |l \pm 1/2|$  мають різну енергію  $E_{nj}$ , що веде до зсуву рівнів і появи спектральних дублетів (рис. 13.1). Зазначимо, що сума величин (13.15) і (13.16) не залежить від  $l$ , хоча кожна з них від  $l$  залежить.

Оскільки причиною спин-орбітального зв'язку є внутрішнє магнітне поле  $\vec{H}_L$ , яке створюється орбітальним магнітним моментом, то величину цього поля можна знайти з виразу (3.15):

$$H_{LS} = \langle \Delta W_{LS} \rangle / M_B \leq 7 \cdot 10^4 \frac{Z^4}{n^3 l^3} \text{ Е}. \quad (13.19)$$

Видно, що це поле швидко зменшується зі зростанням  $n$  і  $l$ . Цей зв'язок можна розірвати, якщо помістити атом у сильне зовнішнє поле з напруженістю  $H > H_{LS}$ . У такому полі спіновий і орбітальний моменти будуть квантуватися незалежно. Якщо атом містить багато електронів, то при цьому відбувається незалежне квантування сумарного

спінового  $\vec{S} = \sum_n \vec{S}_n$  і сумарного орбітального  $\vec{L} = \sum_n \vec{L}_n$  моментів. Це так званий випадок  $\vec{L}\vec{S}$  зв'язку або зв'язку Рассель – Саундерса.



**Рис. 13.1.** Тонка структура трьох нижніх рівнів енергії, викликана спін-орбітальною взаємодією та дією релятивістських ефектів. Стрілками показано оптичні переходи, досліджені при побудові моделі спіну

У протилежному випадку  $H < H_{LS}$  внутрішнє магнітне поле пов'язує спіновий і орбітальний моменти та утворює сумарний момент  $\vec{J}$ , який характеризує стан електрона. За наявності такого слабкого зовнішнього поля відбувається квантування сумарного моменту  $\vec{J} = \sum_n \vec{J}_n$ , що відповідає  $\vec{J}\vec{J}$  зв'язку.

### 13.2. Тотожності мікрочастинок і принцип Паулі

Розглянемо властивості системи, яка складається з однакових частинок, тобто таких, що мають однакову масу, заряд, спін і за однакових умов ведуть себе однаково. Усі властивості такої системи описуються стаціонарним або нестаціонарним рівняннями Шредінгера:

$$\hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)\Psi(q_1, \dots, q_N, t) = E\Psi(q_1, \dots, q_N, t), \quad (13.20, a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q_1, \dots, q_N, t)}{\partial t} = \hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)\Psi(q_1, \dots, q_N, t) \quad (13.20, б)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_N, t) = \sum_{k=1}^N \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_k + V(q_k, t) \right\} + \sum_{k \neq j=1}^N W(q_k, q_j), \quad (13.21)$$

де  $q_k = \{x_k, y_k, z_k, S_{zk}\}$  – повний набір координат частинки,  $W(q_k, q_j)$  – енергія взаємодії пари частинок.

Введемо оператор перестановок  $\hat{P}_{jk}$ , дія якого визначається рівнянням

$$\hat{P}_{jk} F(q_1, \dots, q_k, q_j, \dots, q_N, t) = F(q_1, \dots, q_j, q_k, \dots, q_N, t). \quad (13.22)$$

У системі однакових (тотожних) частинок дія оператора  $\hat{P}_{jk}$  не змінює  $\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ :

$$\hat{P}_{jk} \hat{H}(q_1, \dots, q_N, t) = \hat{H}(q_1, \dots, q_N, t). \quad (13.23)$$

Це відповідає тому, що  $\hat{P}_{jk}$  комутує з  $\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_N, t)$ .

Розглянемо дію  $\hat{P}_{jk}$  на хвильову функцію  $\Psi(q_1, \dots, q_k, q_j, \dots, q_N, t)$ :

$$\hat{P}_{jk} \Psi(q_1, \dots, q_k, q_j, \dots, q_N, t) = \tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_j, q_k, \dots, q_N, t). \quad (13.24)$$

Оскільки перестановка місцями двох частинок не змінює  $\hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)$ , то перетворена функція  $\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t)$  відповідає рівнянням Шредінгера:

$$\hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t) = E\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t), \quad (13.25, a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t)}{\partial t} = \hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t), \quad (13.25, б)$$

які можна отримати, якщо подіяти оператором  $\hat{P}_{jk}$  на (13.20). Оскільки оператор Гамільтона в рівняннях (13.20) і (13.25) є однаковим, то відповідні розв'язки цих рівнянь  $\Psi(q_1, \dots, q_N, t)$  та  $\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t)$  можуть відрізнитися тільки на постійну величину  $\lambda$ :

$$\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N, t) = \lambda \Psi(q_1, \dots, q_N, t), \quad (13.26)$$

яка визначається умовою  $|\lambda| = 1$ . Цю величину можна знайти, якщо подіяти оператором  $\hat{P}$  на рівняння (13.24) і врахувати, що подвійна перестановка частинок однієї пари приводить до початкового стану  $\Psi(q_1, \dots, q_N, t)$ :

$$\hat{P}\hat{P}\Psi(q_1, \dots, q_N, t) = \lambda\hat{P}\Psi(q_1, \dots, q_N, t) = \lambda^2\Psi(q_1, \dots, q_N, t) \equiv \Psi(q_1, \dots, q_N, t). \quad (13.27)$$

Видно, що  $\lambda^2$  є власним значенням оператора  $\hat{P}^2$ . З останньої рівності в (13.27) знаходимо, що  $\lambda^2 = 1$ , або  $\lambda = \pm 1$ . Звідси випливає, що існують два типи хвильових функцій, а саме: функції, які відповідають умові

$$\hat{P}\Psi_s(q_1, \dots, q_N, t) = \Psi_s(q_1, \dots, q_N, t), \quad (13.28, а)$$

їх називають *симетричними*. Відповідно функції, для яких

$$\hat{P}\Psi_a(q_1, \dots, q_N, t) = -\Psi_a(q_1, \dots, q_N, t), \quad (13.28, б)$$

називають *антисиметричними*.

Унаслідок рівноправності всіх частинок умова симетрії стосується всіх можливих перестановок. У цьому легко переконатися, якщо припустити, що функція є симетричною, наприклад, щодо перестановок  $k \leftrightarrow j, j \leftrightarrow i$  та антисиметричною щодо  $j \leftrightarrow k$ . Враховуючи ці правила, маємо

$$\Psi(q_i q_j q_k) = -\Psi(q_i q_k q_j) = -\Psi(q_k q_i q_j) = -\Psi(q_k q_j q_i) = -\Psi(q_i q_j q_k). \quad (13.29)$$

Прирівнюючи початок і кінець цих перетворень, отримуємо  $\Psi(q_i q_j q_k) = -\Psi(q_i q_j q_k)$ , що відповідає результату  $\Psi(q_i q_j q_k) = 0$ , тобто відсутності стану з такими комбінованими властивостями. Певний тип симетрії не змінюється із часом. Це випливає з нестационарного рівняння Шредінгера (13.20, б), якщо представити його у вигляді рівняння

$$\Delta\Psi(q_1, \dots, q_N, t) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H}(q_1, \dots, q_N, t) \Psi(q_1, \dots, q_N, t) \Delta t. \quad (13.30)$$

Із (13.30) видно, якщо  $\hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)$  – симетрична функція, то зміна функції  $\Delta\Psi(q_1, \dots, q_N, t)$  зі зміною часу пропорційна самій функції  $\Psi(q_1, \dots, q_N, t)$  і отже, не змінює тип симетрії. Цю властивість можна

довести інакше, якщо згадати, що оператор перестановки комутує з оператором Гамільтона. Оскільки оператор перестановки явно не залежить від часу, то це доводить, що він є інтегралом руху

$$\frac{d\hat{P}}{dt} = \frac{\partial\hat{P}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{P}\hat{H}(q_1, \dots, q_N, t)] = 0. \quad (13.31)$$

Оскільки два класи функцій не змішуються між собою, то вибір того або іншого класу залежить тільки від природи частинок, які утворюють систему. Дослідним шляхом було встановлено, що в природі існують типи частинок, які належать кожному з класів симетрії.

Система частинок, які характеризуються спіном, проекція якого дорівнює цілому числу сталих Планка ( $S = \hbar\sqrt{l_s(l_s + 1)}$ ,  $S_z = m_s\hbar$ ,  $m_s = -l_s, -l_s + 1, -l_s + 2, \dots, l_s$ ), описується симетричною функцією  $\Psi_s(q_1, \dots, q_N, t)$ . Ці частинки називають *частинками Бозе* (або *бозонами*), а їх сукупність – *ансамблем Бозе – Ейнштейна*. Прикладом бозонів є  $\pi$ -мезони, які є переносниками сильної взаємодії в ядерній фізиці і фізиці елементарних частинок (для них  $l_s = 0$ ,  $S_z = 0$ ); фотони (для них  $l_s = 1$ ,  $S_z = 0, \pm\hbar$ ); гравітони (для них  $l_s = 2$ ,  $S_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$ ).

Система частинок, які характеризуються півцілим спіном ( $S_z = m_s\hbar$ ,  $m_s = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots, \pm l_s$ ), описується антисиметричною функцією  $\Psi_a(q_1, \dots, q_N, t)$ . Ці частинки називають *частинками Фермі – Дірака*, або *ферміонами*, а їх сукупність – *ансамблем Фермі – Дірака*. Прикладом ферміонів є електрони, протони, нейтрони тощо (для них  $S_z = \hbar/2$ ).

Приналежність системи, яка сама складається з комбінованих частинок (напр., система ядер, атомів, молекул), до певного класу визначається кількістю і класом більш простих частинок, з яких складається кожна комбінована частинка. Наприклад, атомарний газ водню складається з атомів, кожний з яких містить два ферміони (електрон і протон). Сумарний спін кожного атома водню дорівнює цілому числу сталих Планка ( $S_z = 0$  або  $S_z = \hbar$  залежно від взаємної орієнтації спінів).

Таким чином, кожний атом водню є бозоном, а атомарний газ – ансамблем Бозе – Ейнштейна й описується функцією  $\Psi_s(q_1, \dots, q_N, t)$ . На противагу цьому атомарний газ важкого водню (дейтерію) є ансамблем Фермі – Дірака й описується функцією  $\Psi_a(q_1, \dots, q_N, t)$ . Це пов'язано з тим, що кожне з ядер дейтерію містить два ферміони (протон і нейтрон), а повний спін атома дейтерію (з урахуванням електрона) дорівнює  $S_z = \hbar/2$  або  $S_z = 3\hbar/2$  залежно від взаємної орієнтації спінів частинок.

Корисно зазначити одну особливість фотонів як елементарних частинок зі спіном  $S_z = \hbar$ . Цей спін може квантуватись у просторі, що відповідає можливості  $g = 2l_z + 1$  різних проєкцій. Виникає питання: чому фотон має лише дві просторові орієнтації (вони відповідають лівій і правій поляризаціям), хоча їх має бути три? Відповідь на це питання пов'язана з тим, що фотон є повністю релятивістською частинкою, тобто не має маси спокою, унаслідок чого не існує системи координат, де він буде нерухомим. Це приводить до того, що не існує системи координат, у якій  $g = 2l_z + 1$ .

Розглянемо особливості системи ферміонів. У 1928 р. В. Паулі сформулював таке правило (принцип): *у системі ферміонів у кожному момент часу в кожному стані, який визначається повним набором квантових чисел, не може бути більше одного ферміона*. Якщо застосувати цей принцип до системи електронів у атомі, то впливає, що в будь-якому конкретному стані, який визначається чотирма квантовими числами  $(n, l, m, m_s)$  або  $(n, l, j, m_j)$  у довільний момент часу не може бути більше одного електрона.

Покажемо на прикладі найпростішої системи з двох електронів, що цей принцип Паулі є наслідком антисиметрії хвильової функції для системи ферміонів. Розглянемо систему з двох електронів, що описується антисиметричною функцією  $\Psi(q_1, q_2, t)$ . Введемо оператори Гамільтона  $\hat{H}(q_i)$  для кожного із цих електронів, враховуючи їх взаємодію з ядром і не враховуючи їх взаємодію між собою. Власні функції цих операторів визначають із системи рівнянь для різних  $\tilde{n}_i$ :

$$\hat{H}(q_i)\Psi_{\tilde{n}_i}(q_i) = E_{\tilde{n}_i}\Psi_{\tilde{n}_i}(q_i), \quad (13.32)$$

де  $\tilde{n}_i = \{n_i, l_i, m_i, m_{s_i}\}$  – скорочене позначення сукупності чотирьох квантових чисел.

Власні функції рівнянь (13.32) не описують стан електрона в атомі, але утворюють повний набір ортогональних функцій і для них справедливі умови:

$$\int \Psi_{\tilde{n}_1}^*(q_1)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_1)dq_1 = \delta_{\tilde{n}_1\tilde{n}_1}, \quad (13.33, a)$$

$$\int \Psi_{\tilde{n}_2}^*(q_2)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_2)dq_2 = \delta_{\tilde{n}_2\tilde{n}_2}. \quad (13.33, б)$$

Розкладемо функцію всієї системи  $\Psi(q_1, q_2, t)$  за добутком цих власних функцій

$$\Psi(q_1, q_2, t) = \sum_{\tilde{n}_1} \sum_{\tilde{n}_2} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_1)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_2). \quad (13.34)$$

Із (13.34), використовуючи (13.33), легко знайти

$$c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) = \iint \Psi(q_1, q_2, t)\Psi_{\tilde{n}_1}^*(q_1)\Psi_{\tilde{n}_2}^*(q_2)dq_1dq_2. \quad (13.35)$$

Зміст величини

$$|c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t)|^2 \equiv W(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) \equiv W(n_1, l_1, m_1, m_{s1}; n_2, l_2, m_2, m_{s2}; t) \quad (13.36)$$

полягає в тому, що вона характеризує ймовірність перебування першої частинки в момент часу  $t$  у стані з квантовими числами  $n_1, l_1, m_1, m_{s1}$ , а другої – у стані з  $n_2, l_2, m_2, m_{s2}$ . Поміняємо місцями два електрони, залишивши їх у тих самих станах. При цьому функція (13.34) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \Psi(q_2, q_1, t) &= \sum_{\tilde{n}_1} \sum_{\tilde{n}_2} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_2)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_1) = \\ &= \sum_{\tilde{n}_2} \sum_{\tilde{n}_1} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_2)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_1). \end{aligned} \quad (13.37)$$

З іншого боку, враховуючи, що  $\Psi(q_1, q_2, t)$  є антисиметричною, проведена перестановка приведе до заміни

$$\Psi(q_2, q_1, t) = -\Psi(q_1, q_2, t) = -\sum_{\tilde{n}_1} \sum_{\tilde{n}_2} c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_1)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_2). \quad (13.38)$$

Вираз (13.37) можна перетворити, якщо згадати, що індекси  $\tilde{n}_i = \{n_i, l_i, m_i, m_{s_i}\}$  характеризують квантові числа, повний перелік яких є однаковим для однакових частинок. Вираз (13.37) не зміниться, якщо при обчисленні сум зробити формальну заміну  $\tilde{n}_1 \leftrightarrow \tilde{n}_2$ :

$$\Psi(q_2, q_1, t) = \sum_{\tilde{n}_2} \sum_{\tilde{n}_1} c(\tilde{n}_2, \tilde{n}_1, t)\Psi_{\tilde{n}_2}(q_2)\Psi_{\tilde{n}_1}(q_1). \quad (13.39)$$

Прирівнюючи (13.38) і (13.39), знаходимо

$$c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, t) = -c(\tilde{n}_2, \tilde{n}_1, t). \quad (13.40)$$

Якщо в (13.40) покласти  $\tilde{n}_1 = \tilde{n}_2$ , то отримаємо результат

$$c(\tilde{n}_i, \tilde{n}_i, t) = -c(\tilde{n}_i, \tilde{n}_i, t), \quad (13.41)$$

згідно з яким ймовірність (13.36) того, що обидва електрони в один і той самий момент часу перебувають у одному й тому самому стані, дорівнює нулю

$$W(\tilde{n}_i, \tilde{n}_i, t) = 0. \quad (13.42)$$

Цей результат доводить принцип Паулі, який лежить в основі фізики атомних і ядерних систем.

### 13.3. Хвильова функція системи ферміонів і бозонів

Необхідність виконання умов симетрії визначає вигляд хвильової функції системи частинок. Розглянемо випадок системи  $N$  незалежних тотожних ферміонів. Оператор Гамільтона такої системи має вигляд

$$\hat{H}(q_1, \dots, q_N) = \hat{H}_1(q_1) + \hat{H}_2(q_2) + \dots + \hat{H}_N(q_N). \quad (13.43)$$

Хвильова функція, яка описує стан кожного із ферміонів, є розв'язком рівняння

$$\hat{H}_i(q_i)\Psi_{\tilde{n}_i}(q_i) = E_{\tilde{n}_i}\Psi_{\tilde{n}_i}(q_i). \quad (13.44)$$

Хвильову функцію системи можна записати у вигляді

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \sum_{\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_N} c(\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_N) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) \dots \Psi_{\tilde{n}_N}(q_N). \quad (13.45)$$

У загальному випадку ця функція не є симетричною або антисиметричною. Якщо це система ферміонів, то (13.45) необхідно привести до антисиметричного вигляду. Розглянемо цю процедуру на прикладі системи з двох ферміонів, повна хвильова функція якої з урахуванням умови  $c(\tilde{n}_2, \tilde{n}_1) = -c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2)$  має вигляд

$$\begin{aligned} \Psi(q_1, q_2) &= c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) + c(\tilde{n}_2, \tilde{n}_1) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_1) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_2) = \\ &= c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2) \{ \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) - \Psi_{\tilde{n}_2}(q_1) \Psi_{\tilde{n}_1}(q_2) \}. \end{aligned} \quad (13.46)$$

Цю функцію можна переписати у вигляді матриці (визначника)

$$\Psi(q_1, q_2) = c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2) \begin{vmatrix} \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) & \Psi_{\tilde{n}_1}(q_2) \\ \Psi_{\tilde{n}_2}(q_1) & \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) \end{vmatrix}, \quad c(\tilde{n}_1, \tilde{n}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (13.47)$$

Така форма запису автоматично забезпечує зміну знака функції при перестановці місцями частинок (заміні стовпців).

Аналогічним чином будується антисиметрична функція системи при більшій кількості частинок

$$\Psi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\tilde{n}_1}(q_1) & \Psi_{\tilde{n}_1}(q_2) & \dots & \Psi_{\tilde{n}_1}(q_N) \\ \Psi_{\tilde{n}_2}(q_1) & \Psi_{\tilde{n}_2}(q_2) & \dots & \Psi_{\tilde{n}_2}(q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{\tilde{n}_N}(q_1) & \Psi_{\tilde{n}_N}(q_2) & \dots & \Psi_{\tilde{n}_N}(q_N) \end{vmatrix}. \quad (13.48)$$

Визначник (13.48) називають *визначником Слеттера*.

Для системи бозонів хвильова функція, скомпонована з (13.45) відповідним підбором коефіцієнтів, має бути симетричною. Її можна записати у вигляді

$$\Psi(q_1, \dots, q_N, t) = \sqrt{\frac{N_1! N_2! \dots N_N!}{N!}} \sum_{\hat{P}} \Psi_{\hat{P}\tilde{n}_1}(q_1) \Psi_{\hat{P}\tilde{n}_2}(q_2) \dots \Psi_{\hat{P}\tilde{n}_N}(q_N), \quad (13.49)$$

де  $\hat{P}$  – оператор перестановки частинок,  $N_k$  – кількість тотожних бозонів у стані  $\tilde{n}_k$ ,  $N = \sum_{k=1}^N N_k$ .

#### Контрольні запитання

1. Пояснити, чому в  $s$ -стані відсутній спін-орбітальний зв'язок?
2. Визначити, які з молекул  $D_2, HD, H_2, H_2^+, T_2, T_2^+, DT, HT$  у газі будуть бозонами, а які ферміонами?
3. Два атоми із заповненими зовнішніми оболонками стискаються зовнішніми силами до утворення молекули. Пояснити, чому такий процес вимагає виконання роботи?

**Література:** [1], § 114–117; [6], § 3; [4], § 74.

## § 14. Статистична модель атома Томаса – Фермі

### 14.1. Особливості системи вільного виродженого фермі-газу

Необхідність виконання принципу Паулі приводить до формування вироджених станів атомних електронів у області навколо ядра та до можливості розрахунку їх просторового розподілу на основі використання законів квантової статистики.



Коротко нагадаємо основи квантової статистики. Спочатку розглянемо характеристики системи виродженого вільного електронного газу, який складається з  $N$  частинок і локалізований в об'ємі  $V$ . Визначимо принципи квантування стану такого газу при низькій температурі. З умови квантування одномірного руху

$$\oint p_i dq_i = 2\pi\hbar(n_i + 1/2), \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (14.1)$$

випливає, що одномірний фазовий об'єм цього газу  $\oint p_i dq_i$  може змінюватись тільки на величину, кратну мінімальному значенню

$$\delta\Gamma_i = \delta\left\{\oint p_i dq_i\right\} = 2\pi\hbar. \quad (14.2)$$

При тривимірному русі мінімальний фазовий об'єм (квант тривимірного фазового об'єму) дорівнює

$$\delta\Gamma = (2\pi\hbar)^3. \quad (14.3)$$

Якщо параметри системи характеризуються повним фазовим об'ємом  $\Gamma$ , то в ній може бути

$$N = \frac{\Gamma}{\delta\Gamma} = \frac{\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} \quad (14.4)$$

незалежних станів. У межах "фізичного" об'єму  $V$  електрони заповнюють фазовий об'єм

$$\Gamma(V, p) = \int d^3p \int d^3r = 4\pi V \int_0^p p'^2 dp'. \quad (14.5)$$

Якщо кожний зі станів може бути заповнений двома електронами з різною орієнтацією спіну, то величини (14.4) і (14.5) необхідно збільшити в  $g = (2l_S + 1) = 2$  рази.

Кількість електронів  $N(V, p)$  в об'ємі  $V$  у інтервалі імпульсів від  $p=0$  до  $p$  і їх концентрація  $n_e$  визначаються виразами

$$N(V, p) = g \frac{\Gamma(V, p)}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{Vp^3}{3\pi^2\hbar^3}, \quad (14.6)$$

$$n_e = \frac{N(V, p)}{V} = \frac{p^3}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (14.7)$$

Із (14.7) можна знайти вирази для густини розподілу електронів за їх імпульсам  $f(p)$  і відстані між найближчими станами в імпульсному просторі  $\frac{\partial p}{\partial n_e}$  в одиниці об'єму

$$f(p) = \frac{\partial n_e}{\partial p} = \frac{p^2}{\pi^2\hbar^3}, \quad \frac{\partial p}{\partial n_e} = \frac{\pi^2\hbar^3}{p^2}. \quad (14.8)$$

Із (14.7) та (14.8) знаходимо вирази для максимальної енергії одного електрона (енергії Фермі  $E_F(p)$ ) за умови  $E_{\max}(p) \gg k_B T$ :

$$\frac{p^2}{2\mu} = E_{\max}(p) = (3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2\mu} n_e^{2/3} \quad (14.9)$$

і повної енергії виродженого нерелятивістського електронного газу в об'ємі  $V$  у інтервалі імпульсів від  $p=0$  до  $p$ :

$$E(p' \leq p, V) = V \int_0^p \frac{p'^2}{2\mu} f(p') dp' = \frac{3(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{10\mu} N n_e^{2/3}. \quad (14.10)$$

Середня енергія одного електрона

$$\frac{E(p' \leq p, V)}{N} = \frac{3(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{10\mu} n_e^{2/3} \quad (14.11)$$

дорівнює  $(3/5)E_F(p)$ .

Із (14.10) можна знайти вираз для кінетичного тиску вільного виродженого нерелятивістського електронного газу

$$P = -\frac{\partial E(p' \leq p, V)}{\partial V} = -\frac{\partial}{\partial V} \frac{3(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{10\mu V^{2/3}} N^{5/3} = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5\mu} n_e^{5/3}. \quad (14.12)$$

Такі рівняння стану відповідають вільному ідеальному виродженому нерелятивістському електронному газу.

## 14.2. Розподіл виродженого фермі-газу електронів у полі атомного ядра та самоузгоджене рівняння стану

Розглянемо особливості розподілу виродженого газу електронів у полі атомного ядра. Розглянемо атом, який представляє ядро та систему електронів (рис. 14.1). Просторовий розподіл електронів є на

слідком дії двох механізмів – сумісної дії електричного поля ядра та поля системи атомних електронів, що приводить до появи самоузгодженого потенціалу  $\varphi(r)$ , а також законів квантової статистики, яка базується на принципі Паулі.

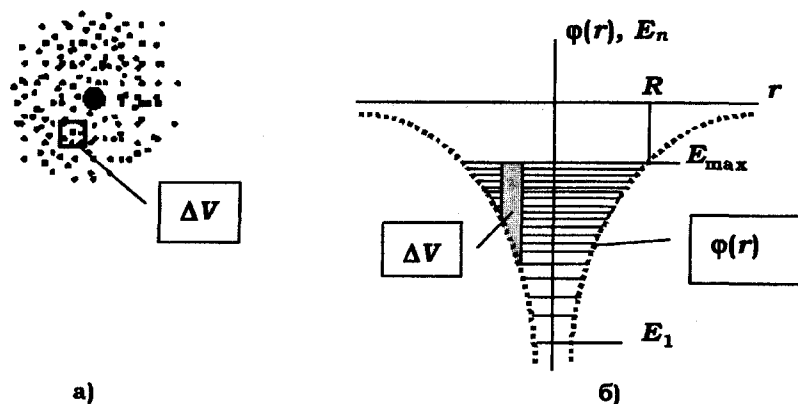


Рис. 14.1. Просторовий (а) та енергетичний (б) розподіл електронів у самоузгодженому потенціалі ядра та системи електронів  $\varphi(r)$

Відповідно до принципу Паулі на кожному заповненому рівні енергії може бути не більше двох електронів з протилежною орієнтацією спінів. Кожний із рівнів характеризується певною енергією. Якщо температура електронного газу в атомі із зарядом ядра  $Z$  менша, ніж відстань між рівнями енергії, то всі рівні від самого глибокого  $E_1$  і до найвищого рівня з номером  $Z/2$  та енергією  $E_{\max}$  будуть заповненими (рис. 14.1, б). Усі рівні з енергією  $E > E_{\max}$  будуть порожніми. Імпульс електрона  $p(r)$  на довільному заповненому рівні з енергією  $E$  відповідає рівнянню

$$E = \frac{p^2(r)}{2\mu} - e\varphi(r). \quad (14.13)$$

Максимальний імпульс електрона відповідає найвищому заповненому рівню

$$p_0(r) = \sqrt{2\mu[E_{\max} + e\varphi(r)]}. \quad (14.14)$$

Виділимо невеликий об'єм  $\Delta V$  у межах атома в околі точки з координатою  $\vec{r}$  (рис. 14.1). Розмір цього об'єму  $\langle l \rangle \approx \sqrt[3]{\Delta V}$  має, з одного боку, значно перевищувати середню відстань між електронами, а з іншого, – бути значно меншим, ніж розмір атома. Вважатимемо також, що в межах цього об'єму самоузгоджений потенціал  $\varphi(r)$  є постійною величиною. Для справедливості статистичного розгляду необхідно, щоб у межах  $\Delta V$  було досить багато електронів. У межах цього "фізичного" об'єму електрони заповнюють фазовий об'єм

$$\Delta\Gamma = \int d^3p \int d^3r = 4\pi\Delta V \int_0^{p_0(r)} p^2 dp = \frac{4\pi\Delta V p_0^3(r)}{3}. \quad (14.15)$$

Кількість електронів у межах  $\Delta V$  визначається виразом, аналогічним формулі (14.6),

$$\Delta N(\Delta V, p_0) = g \frac{\Delta\Gamma}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{\Delta V p_0^3(r)}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (14.16)$$

Із цієї формули знаходимо співвідношення

$$p_0(r) = (3\pi^2\hbar^3 n_e(r))^{1/3}, \quad n_e(r) = \Delta N(\Delta V, p_0) / \Delta V, \quad (14.17)$$

яке пов'язує локальну концентрацію атомних електронів  $n_e(r)$  з максимальним імпульсом  $p_0(r)$ , що відповідає електрону, розташованому на найвищому заповненому рівні енергії. Енергія цього рівня визначається виразом

$$\frac{p_0^2(r)}{2\mu} - e\varphi(r) = -e\varphi(R) \equiv -|E_{\max}|, \quad (14.18)$$

де  $\varphi(R)$  – поки невідомий самоузгоджений потенціал на межі атома (при  $r = R$ ). Виключаючи величину  $p_0(r)$  з (14.17) і (14.18), знаходимо рівняння зв'язку між локальною концентрацією атомних електронів  $n_e(r)$  і самоузгодженим потенціалом  $\varphi(r)$ :

$$n_e(r) = \frac{[2\mu e(\varphi(r) - \varphi(R))]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (14.19)$$

Поставимо граничні умови для розглядуваної статистичної моделі нейтрального атома

$$\varphi(r \geq R) = 0, \quad \varphi(r \rightarrow 0) = \frac{Ze}{r}. \quad (14.20)$$

На межі атома  $n_e(R) = 0$ . Із рівняння (14.19), використовуючи умову (14.20), знаходимо, що  $\varphi(R) = 0$ , а рівняння (14.19) набуває остаточно-го вигляду

$$n_e(r) = \frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (14.21)$$

Для визначення самоузгодженого потенціалу в межах атома використаємо рівняння Пуассона

$$\Delta\varphi(r) = -4\pi\rho_e(r) = 4\pi en_e(r) = 4\pi e \frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (14.22)$$

Для сферично-симетричного самоузгодженого потенціалу  $\varphi(r)$  похідні за кутовими змінними в (14.22) дорівнюють нулю і (14.22) набуває вигляду

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \varphi(r) = 4\pi e \frac{[2\mu e\varphi(r)]^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (14.23)$$

Це співвідношення називають *рівнянням Томаса – Фермі*.

Якщо зробити заміну функції

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} \Phi(r) \quad (14.24)$$

і ввести безрозмірний потенціал  $\Phi(r)$ , нормований на поле ядра, то з рівняння Томаса – Фермі отримаємо рівняння для функції  $\Phi(r)$ :

$$\frac{d^2\Phi(r)}{dr^2} = \frac{4\sqrt{Z}[2\mu e^2\Phi(r)]^{3/2}}{3\pi\hbar^3\sqrt{r}}. \quad (14.25)$$

Якщо додатково зробити заміну змінної

$$x = \frac{r}{r_0}, \quad r_0 = \left( \frac{3\pi^2}{4} \right)^{2/3} \frac{a}{2Z^{1/3}} \approx \frac{0,885a}{Z^{1/3}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad (14.26)$$

то (14.25) зведеться до безрозмірного вигляду

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{\Phi^{3/2}}{\sqrt{x}}. \quad (14.27)$$

Прямою підстановкою  $\Phi(x) = Ax^{\beta}$  легко знайти один із розв'язків

$$\Phi(x) = 144/x^3, \quad (14.28)$$

але він не відповідає граничним умовам  $\Phi(x = R/r_0) = 0$ ,  $\Phi(0) = 1$ . Другий розв'язок  $\Phi(x)$  рівняння (14.27), який відповідає цим умовам, можна знайти тільки чисельними методами. Його вигляд представлено на рис. 14.2, а.

Функція  $\Phi(x)$  має асимптотичний вигляд

$$\Phi(x \ll 1) \approx 1 - 1,588x + \frac{4}{3}x^{3/2}, \quad \Phi(x \gg 1) \approx \frac{144}{x^3}, \quad (14.29)$$

якому відповідає асимптотичний вираз для самоузгодженого потенціалу атома

$$\varphi(r \ll r_0) \approx \frac{Ze}{r} - 1,8 \frac{Ze}{a}, \quad \varphi(r \gg r_0) \approx 207 \frac{Za^3}{r^3}. \quad (14.30)$$

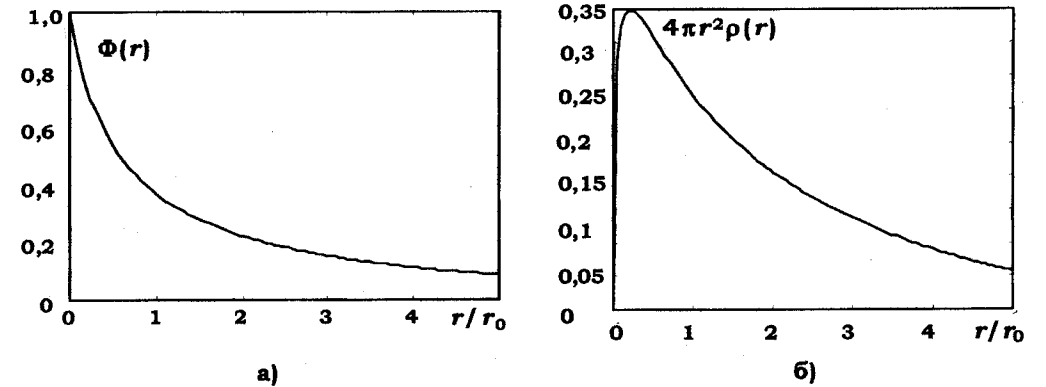


Рис. 14.2. Нормований потенціал  $\Phi(r)$  – (а); функція радіального розподілу густини електронів  $D_e(r) = 4\pi r^2 n_e(r) = Z\sqrt{r/r_0^3} \Phi^{3/2}(r/r_0)$  в атомі – (б)

Враховуючи вираз (14.21) для концентрації електронів у самоузгодженому потенціалі  $\varphi(r)$ , можна знайти об'ємну густину електричного заряду в атомі

$$n_e(r) = \frac{Z}{4\pi\sqrt{r^3 r_0^3}} \Phi^{3/2}(r/r_0), \quad (14.31)$$

а також функцію радіального розподілу густини електронів у атомі

$$D_e(r) = 4\pi r^2 n_e(r) = Z\sqrt{r/r_0^3} \Phi^{3/2}(r/r_0), \quad (14.32)$$

яка представлена на рис. 14.2, б. Функція  $D_e(r)$  добре узгоджується з реальним радіальним електронним розподілом у атомах. Відмінність полягає лише в тому, що в атомах цей розподіл додатково слабо мо-

дульований зі зростанням відстані, що є наслідком наявності електронних оболонок.

Згідно зі статистичною моделлю Томаса – Фермі атом не має різких меж, що узгоджується з точним квантово-механічним аналізом на основі використання хвильової функції. Відмінність полягає в характері спадання величини  $n_e(r)$  (при точному розрахунку це експоненціальний закон  $n_e(r) \sim \exp(-2Zr/a)$ , а в статистичній моделі – степеневий  $n_e(r) \sim 1/r^6$ ).

Із моделі Томаса – Фермі можна отримати багато корисних даних про атом, які важко обчислити, якщо використовувати точний розв'язок. Звідси випливає, що 50 % усіх електронів перебувають на відстані, що не перевищує  $1,33a/Z^{1/3}$ . З інших корисних даних можна навести вираз для енергії повної іонізації атома

$$E_{\text{іон}} \approx 0,77Z^{7/3} \frac{\mu e^4}{\hbar^2} \approx 21Z^{7/3} \text{ еВ.} \quad (14.33)$$

Зазначимо, що рівняння Томаса – Фермі є некоректним як на дуже великій  $r \gg a$ , так і на дуже малій відстані  $r \ll a/Z$  від ядра. На малій відстані (якій відповідають квантові рівні з малим значенням квантового числа  $n \geq 1$ ) не виконується умова квантування (14.1), а на великій (якій відповідає дуже мала енергія електронів) довжина хвилі де Бройля стає настільки великою, що може перевищувати розмір атома. Таким чином, область застосування результатів розрахунку за моделлю Томаса – Фермі обмежена інтервалом  $a/Z < r < a$ .

#### Контрольні запитання

1. Як співвідносяться середня енергія електронів у виродженому нерелятивістському газі та енергія Фермі для цього газу?
2. Чим відрізняється просторовий розподіл електронів у вільному виродженому газі від газу за наявності ядра?
3. Які існують підстави вважати електрони в атомі виродженим газом?
4. Чи можуть електрони в атомі бути виродженим релятивістським газом?

**Література:** [3], § 91; [4], § 70.

## Розділ VI

### НАБЛИЖЕНІ МЕТОДИ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

#### § 15. Наближені методи розв'язання задач квантової механіки. Метод квазікласичного наближення (метод Вентцеля – Крамерса – Бріллюена)

##### 15.1. Хвильова функція у квазікласичному наближенні

Рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V(\vec{r}) \quad (15.1)$$

є основним рівнянням квантової механіки. Розроблено кілька методів, які дозволяють знаходити наближені аналітичні розв'язки цього рівняння, точність яких у багатьох випадках є достатньою як для практичного застосування, так і для розвитку апарату квантової механіки. Перший із цих методів називається *методом квазікласичного наближення* або *методом Вентцеля – Крамерса – Бріллюена* (скорочено – *метод ВКБ*). Він базується на тому факті, що рівняння квантової механіки мають неперервно переходити в рівняння класичної фізики

при переході від параметрів мікросистеми до параметрів, які характерні для макросистем (зокрема при збільшенні енергії). Із цього факту випливає, що за деяких умов можна розв'язувати рівняння Шредінгера методами, близькими до методів класичної фізики.

Шукаємо розв'язок (15.1) у вигляді функції

$$\Psi(\vec{r}) = \exp\left\{i \frac{S(\vec{r})}{\hbar}\right\}, \quad (15.2)$$

де  $S(\vec{r})$  – функції дії, а повна фаза експоненти  $S(\vec{r})/\hbar$  – ейконал. Отримуємо рівняння

$$-i \frac{\hbar}{2\mu} \Delta S(\vec{r}) + \frac{(\nabla S(\vec{r}))^2}{2\mu} = E - V(\vec{r}), \quad (15.3)$$

яке подібне до рівняння класичної фізики Гамільтона – Якобі, а відрізняється від нього лише наявністю першого доданка зліва  $-i \frac{\hbar}{2\mu} \Delta S(\vec{r})$ .

При формальному граничному переході  $\hbar \rightarrow 0$  ці рівняння будуть збігатися. Ця обставина підказує метод пошуку розв'язку (15.1) у вигляді формалізованого ряду за степенями відповідно нормованої сталої Планка

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (15.4)$$

Критерій використання такого підходу буде сформульований нижче.

Для спрощення викладок подальший аналіз будемо проводити для одномірного рівняння Шредінгера

$$-i \frac{\hbar}{2\mu} S''(x) + \frac{(S'(x))^2}{2\mu} = E - V(x). \quad (15.5)$$

Підставимо (15.4) у (15.5):

$$\frac{1}{2\mu} \left( S_0' + \frac{\hbar}{i} S_1' + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2' + \dots \right)^2 - \frac{i\hbar}{2\mu} \left( S_0'' + \frac{\hbar}{i} S_1'' + \dots \right) = E - V(x). \quad (15.6)$$

У нульовому порядку за величиною  $\hbar$  з (15.6) маємо

$$\frac{1}{2\mu} \left( \frac{dS_0}{dx} \right)^2 = E - V(x), \quad (15.7)$$

$$S_0 = \pm \int p(x) dx, \quad p(x) = \sqrt{2\mu(E - V(x))}.$$

Цей результат безпосередньо випливає з (15.5), якщо врахувати, що другий доданок зліва має набагато перевищувати перший, що відповідає умові

$$|S_0'|^2 \gg \hbar |S_1''|, \quad (15.8)$$

яку можна, враховуючи (15.7), переписати таким чином:

$$\hbar \left| \frac{S_0''}{S_0'^2} \right| = \left| \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{S_0'} \right) \right| = \left| \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}. \quad (15.9)$$

Ця умова показує, що ітераційний процес буде справедливим тоді, коли зміна довжини хвилі де Бройля, яка відповідає руху частинки в неоднорідному полі  $V(x)$ , буде малою на інтервалі шляху, що дорівнює цій довжині хвилі.

Можна знайти іншу інтерпретацію даної умови, якщо використати співвідношення для імпульсу  $p(x) = \sqrt{2\mu(E - V(x))}$ :

$$\left| \frac{d}{dx} \left( \frac{\hbar}{p(x)} \right) \right| = \left| \frac{\mu\hbar}{p(x)^3} \frac{dV(x)}{dx} \right| \ll 1. \quad (15.10)$$

Видно, що ітераційний процес буде справедливим, якщо потенціальна енергія  $V(x)$  повільно змінюється в просторі, а частинка має великий імпульс. У першому порядку за величиною  $\hbar$  з (15.6) маємо

$$S_1' S_0' + \frac{1}{2} S_0'' = 0. \quad (15.11)$$

Це співвідношення можна привести до вигляду

$$\frac{dS_1}{dx} = -\frac{S_0''}{2S_0'} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \left\{ \ln \left( \frac{dS_0}{dx} \right) \right\} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \{ \ln p(x) \}, \quad (15.12)$$

$$S_1 = \ln D + \ln \sqrt{p(x)}.$$

Із (15.7) і (15.12) отримуємо вирази для функції дії

$$S(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx + \left(\frac{\hbar}{i}\right) \ln(D) + \left(\frac{\hbar}{i}\right) \ln \sqrt{p(x)} \quad (15.13)$$

і хвильової функції

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right\} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right\} = \\ &= \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx + \alpha \right\}. \end{aligned} \quad (15.14)$$

У виразах (15.12) – (15.14) величини  $B, C, D$  є довільними сталими. Функція (15.14) описує рух частинки у вигляді двох зустрічних неоднорідних хвиль. Видно, що ця функція дійсно поєднує класичні та

квантові характеристики. Зокрема фаза хвильової функції  $\pm \int p(x) dx / \hbar$  є типовою квантовою характеристикою, яка у випадку руху в однорідному полі зводиться до фази хвилі де Бройля  $\pm px / \hbar$ .

Амплітудний множник  $A / \sqrt{p(x)}$  у (15.14) є суто класичною характеристикою. Це стає очевидним, якщо врахувати, що отримана з (15.14) імовірність локалізації частинки, яка рухається в неоднорідному полі  $V(x)$  на інтервалі  $\Delta x$ :

$$dW(x) = |\Psi(x)|^2 dx \sim dx / |p(x)| \sim dx / |v(x)|, \quad (15.15)$$

виявляється обернено пропорційною до швидкості руху частинки, що повністю відповідає класичним представленням.

Розв'язок (15.14) справедливий не тільки в класично доступній області (при  $E > V(x)$ ), чому відповідає дійсний імпульс  $p(x)$  та осцилююча хвильова функція):

$$\Psi(x < a) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \sin \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^a p(x) dx + \alpha \right\}, \quad (15.14, a)$$

але й при  $E < V(x)$ , що приводить до суто уявного імпульсу  $p(x) = i |p(x)|$  і до того, що хвильова функція є суперпозицією зростаючого та спадного розв'язків (рис. 15.1):

$$\Psi(x > a) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\} + \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x |p(x)| dx \right\}. \quad (15.14, б)$$

Для випадку необмеженого за ширину бар'єра для забезпечення скінченності  $\Psi(x > a)$  необхідно покласти  $B = 0$ .

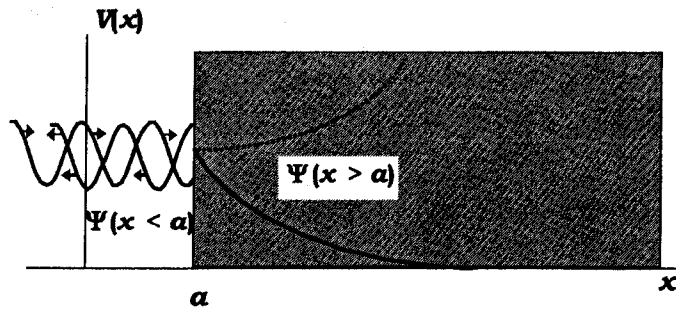


Рис. 15.1. Структура квазікласичного розв'язку  $\Psi(x)$  в області класично дозволеного ( $x < a$ ) і класично забороненого ( $x > a$ ) руху

Розв'язки (15.14, a та б) є некоректними в класичній точці повороту  $x = a$ , де  $E = V(a)$ . У цій точці  $p(a) = 0$ , а критерій (15.10) не виконується. Ця особливість не дозволяє забезпечити безпосереднє зшивання хвильових функцій (15.14, a та б) і визначення коефіцієнтів  $A, B, C$ . Для того, щоб виконати процедуру зшивання, розкладемо потенціальну енергію в околі точки повороту  $x = a$ :

$$V(x) = V(a) + V'(a)(x - a) \quad (15.15)$$

і підставимо цей розклад у вихідне рівняння (15.1):

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} \Psi(x) + V'(a)(x - a)\Psi(x) = 0. \quad (15.16)$$

Це рівняння Ейрі, його легко розв'язати, якщо перейти до імпульсного представлення, поклавши  $\hat{p}_x = p_x, \hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp_x}$ , і перетворити (15.16) на рівняння

$$i\hbar \frac{dc(p_x)}{dp_x} + \left\{ \frac{p_x^2}{2\mu V'(a)} - a \right\} c(p_x) = 0 \quad (15.17)$$

для визначення хвильової функції  $c(p_x)$  у  $p_x$ -представленні. Легко знайти розв'язок цього рівняння першого порядку з роздільними змінними

$$c(p_x) = D \exp \left( i \frac{p_x^3}{6\mu\hbar V'(a)} - i \frac{p_x a}{\hbar} \right). \quad (15.18)$$

Функцію  $\Psi(x)$  можна знайти, використовуючи правило переходу від  $p_x$ -представлення до  $x$ -представлення

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p_x) \exp(i \frac{p_x x}{\hbar}) dp_x, \quad (15.19)$$

яке аналогічне правилу зворотного переходу (9.21) між цими представленнями з урахуванням того, що в  $p_x$ -представленні власна функція оператора  $\hat{x} = i\hbar \frac{d}{dp_x}$  має вигляд  $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(i \frac{p_x x}{\hbar})$ . Якщо зробити заміну змінної  $p_x = y \sqrt{2\mu\hbar V'(a)}$ , то (15.19) набуде вигляду

$$\Psi(x) = G\Phi(t), \quad \Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{y^3}{3} + \xi y\right) dy, \quad \xi = \sqrt{\frac{2\mu V'(a)}{\hbar^2}} (x - a). \quad (15.20)$$

У (15.20) величина  $G$  є новою нормуючою сталою.

Інтеграл  $\Phi(\xi)$  називають *функцією Ейрі*. Її асимптотична поведінка визначається формулами

$$\Phi(\xi \rightarrow -\infty) \rightarrow \frac{\exp\left(-\frac{2}{3}(-\xi)^{3/2}\right)}{2\sqrt[4]{-\xi}}, \quad \Phi(\xi \rightarrow \infty) \rightarrow \frac{\sin\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt[4]{\xi}}. \quad (15.21)$$

Зшивання функцій (15.14, а та б) із функцією (15.20), представленою асимптотичними формулами (15.21), необхідно проводити в областях, які задовольняють умову (15.10). Якщо врахувати розклад потенціальної енергії (15.5), то ця умова набуває вигляду

$$|x - a| \gg \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{\mu |V'(a)|} \right)^{1/3}. \quad (15.22)$$

Таку процедуру необхідно провести окремо для випадків, коли точка повороту  $a$  міститься в областях зростаючої та спадної потенціальної енергії, як це зображено на рис. 15.2.

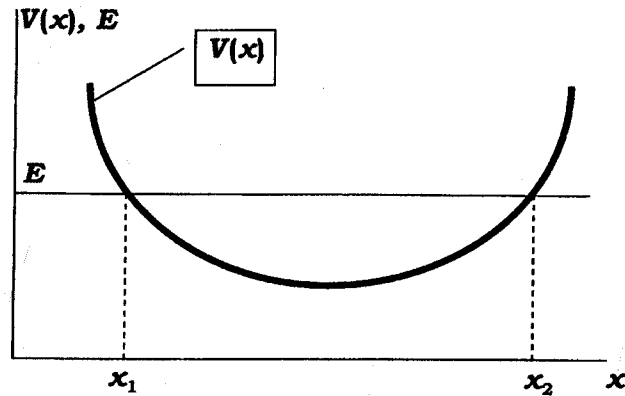


Рис. 15.2. Розташування точок повороту при визначенні правила квантування у квазікласичному наближенні

Остаточний вигляд попарно зв'язаних між собою функцій (15.14, а та б) у точках повороту при спадній ( $x = x_1$ ) і зростаючій ( $x = x_2$ ) потенціальних енергіях буде таким:

$$\begin{aligned} \Psi(x < x_1) &= \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x)| dx\right\}, \\ \Psi(x > x_1) &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\}, \\ \Psi(x < x_2) &= \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\}, \\ \Psi(x > x_2) &= \frac{D}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} |p(x)| dx\right\}. \end{aligned} \quad (15.23)$$

## 15.2. Правило квантування у квазікласичному наближенні

Розв'язки (15.23) дозволяють отримати правило квантування при перебуванні частинки в потенціальній ямі. Ці розв'язки, зокрема, визначають вигляд хвильових функцій у класично дозволеній області  $x_1 \leq x \leq x_2$ , які задані відносно правої ( $\Psi(x < x_2)$ ) або лівої ( $\Psi(x > x_1)$ ) точок повороту. У будь-якій точці області  $x_1 \leq x \leq x_2$  обидва типи заданої функції мають збігатися

$$\frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\} = \frac{D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4}\right\}. \quad (15.24)$$

Для виконання цієї умови насамперед необхідно забезпечити рівність аргументів тригонометричних функцій. Для цього приведемо аргумент правої частини цього рівняння до вигляду, який відповідає аргументу лівої частини:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} &= \frac{1}{\hbar} \left( \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx - \int_x^{x_2} p(x) dx \right) + \frac{\pi}{4} = \\ &= -\left( \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right) + \left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right), \end{aligned} \quad (15.25)$$

і будемо вимагати, щоб наявність виразу в других дужках у останній частині цього рівнянні не впливала на рівність (15.24). Для цього необхідно, щоб цей вираз дорівнював

$$\left( \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{2} \right) = k\pi, \quad k = 1, 2, \dots \quad (15.26)$$

У (15.26) величина  $k$  не може дорівнювати нулю, оскільки при інтегруванні ми враховуємо тільки додатне значення  $p(x)$ . Підставляючи (15.26) і (15.25) у (15.24), знаходимо, що для виконання рівності (15.24) необхідна, окрім (15.26), додаткова умова для амплітуд

$$D = C(-1)^{n+1}. \quad (15.27)$$

Із (15.26) випливає умова квантування

$$2 \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \equiv \oint p(x) dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (15.26),$$

яка з точністю до величини  $1/2$  збігається з умовою квантування Бора – Зомерфельда. Слід зауважити, що критерій правомірності використання квазікласичного наближення (15.10) виконується тільки при великому значенні імпульсу частинки, а це можливо лише при  $n \gg 1$ .

Дослідимо особливості нормування хвильової функції у квазікласичному наближенні. В області класично дозволеного руху  $x_1 \leq x \leq x_2$  умова квантування відповідає виразу

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x)|^2 dx = |C|^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{p(x)} \sin^2 \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right\} dx = 1. \quad (15.27)$$

Враховуючи, що при  $n \gg 1$  аргумент тригонометричної функції  $\sin^2 F(x)$  з (15.27) є швидкозростаючою величиною, сама ця функція є швидкоосцилюючою, її можна замінити середнім значенням, що дорівнює  $1/2$ . Якщо зробити заміну  $p(x) = \mu v(x)$ , то умова нормування та нормівний коефіцієнт набувають вигляду

$$|C|^2 = 2\mu / \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{v(x)} = 2\mu / \int_{t_1}^{t_2} dt = \frac{4\mu}{T} = \frac{2\mu\omega}{\pi}, \quad t_2 - t_1 = \frac{T}{2}, \quad C = \sqrt{\frac{2\mu\omega}{\pi}}, \quad (15.28)$$

де  $t_2 - t_1 = T/2$  – це половина періоду повного коливання частинки між двома точками повороту, а  $\omega$  – частота цих коливань.

### Контрольні запитання

1. Як визначаються граничні умови для методу квазікласичного наближення?
2. Чи можна робити безпосереднє "зшивання" квазікласичної хвильової функції на межі класично дозволеної та класично забороненої областей руху?
2. Чи може квазікласичне наближення використовуватись, якщо імпульс частинки малий?

**Література:** [1], § 37; [2], § 26.

## § 16. Прямий варіаційний метод наближеного розв'язання задач квантової механіки в одно- та багаточастинкових системах

### 16.1. Прямий варіаційний метод Рітца

У ряді випадків наближене обчислення власних хвильових функцій і рівнів енергії можна здійснити за допомогою використання прямого варіаційного методу Рітца. Нехай маємо систему, яка описується рівнянням Шредінгера (15.1) для конкретних квантових станів,

$$\hat{H}\Psi_n(q) = E_n\Psi_n(q)$$

і характеризується невідомим дискретним спектром рівнів енергії й відповідно невідомими власними функціями. Покажемо, що можна знайти наближені розв'язки цього рівняння, використовуючи певну послідовність операцій, у кожній з яких визначається хвильова функція та відповідне їй значення енергії конкретного рівня, починаючи з найнижчого.

1. Покажемо, що енергія найнижчого рівня (основного стану квантової системи) обчислюється як мінімум функціоналу

$$J_0(\alpha_0, \beta_0, \dots) = \int \varphi_0^*(q, \alpha_0, \beta_0, \dots) \hat{H}(q) \varphi_0(q, \alpha_0, \beta_0, \dots) dq \quad (16.1)$$

за додаткової умови нормування

$$\int |\varphi_0(q, \alpha_0, \beta_0, \dots)|^2 dq = 1. \quad (16.2)$$



У цих виразах  $\varphi_0(q, \alpha_0, \beta_0, \dots)$  – це пробна функція координати  $q$ , що містить довільні параметри  $\alpha_0, \beta_0, \dots$ , за допомогою яких шукаємо мінімум (16.2) на основі умов

$$\frac{\partial J_0(\alpha_0, \beta_0, \dots)}{\partial \alpha_0} = \frac{\partial J_0(\alpha_0, \beta_0, \dots)}{\partial \beta_0} = \dots = 0 \quad (16.3)$$

і знаходимо такі значення цих параметрів  $\alpha_0^{(opt)}, \beta_0^{(opt)}, \dots$ , що відповідають цьому мінімуму.

Хвильова функція, яка відповідає найнижчому стану, визначається з виразу

$$\Psi_0(q) \approx \varphi_0(q, \alpha_0^{(opt)}, \beta_0^{(opt)}, \dots). \quad (16.4)$$

Для доведення цих тверджень розкладемо функцію  $\varphi_0(q, \alpha_0, \beta_0, \dots)$  за власними функціями  $\Psi_n(q)$  оператора  $\hat{H}$ :

$$\varphi_0(q, \alpha_0, \beta_0, \dots) = \sum_{n=0} c_n \Psi_n(q), \quad c_n \equiv c_n(\alpha_0, \beta_0, \dots). \quad (16.5)$$

Підставимо цей вираз у (16.1) і врахуємо рівняння Шредінгера

$$J_0(\alpha_0, \beta_0, \dots) = \sum_{n=0} \sum_{m=0} c_n^* c_m \int \Psi_n^*(q) \hat{H}(q) \Psi_m(q) dq = \sum_{n=0} E_n |c_n|^2. \quad (16.6)$$

Для суми, яка стоїть у останньому виразі в (16.6), справедливою є очевидна умова

$$\sum_{n=0} E_n |c_n|^2 \geq E_0 \sum_{n=0} |c_n|^2 = E_0. \quad (16.7)$$

Підставляючи (16.6) у (16.5), отримуємо результат

$$E_0 = \min J_0(\alpha_0, \beta_0, \dots) = J_0(\alpha_0^{(opt)}, \beta_0^{(opt)}, \dots), \quad (16.8)$$

який доводить твердження (16.2).

2. Покажемо, що енергія першого збудженого стану обчислюється, як мінімум функціоналу

$$J_1(\alpha_1, \beta_1, \dots) = \int \varphi_1^*(q, \alpha_1, \beta_1, \dots) \hat{H}(q) \varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots) dq \quad (16.9)$$

за виконання двох додаткових умов:

умови нормування

$$\int |\varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots)|^2 dq = 1 \quad (16.10)$$

та умови ортогональності

$$\int \varphi_0^*(q, \alpha_0^{(opt)}, \beta_0^{(opt)}, \dots) \varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots) dq = 0. \quad (16.11)$$

У цих виразах  $\varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots)$  – пробна функція координати  $q$ , яка містить довільні параметри  $\alpha_1, \beta_1, \dots$ , за допомогою яких шукаємо мінімум (16.9).

Хвильова функція, яка відповідає першому збудженому стану відповідає виразу

$$\Psi_1(q) \approx \varphi_1(q, \alpha_1^{(opt)}, \beta_1^{(opt)}, \dots). \quad (16.12)$$

Для доведення цих тверджень розкладемо функцію  $\varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots)$  за власними функціями  $\Psi_n(q)$  оператора  $\hat{H}$ :

$$\varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots) = \sum_{n=1} b_n \Psi_n(q), \quad b_n \equiv b_n(\alpha_1, \beta_1, \dots). \quad (16.13)$$

У розкладі (16.13) відсутній член  $b_0 \Psi_0(q)$ . Це пов'язано з тим, що згідно з умовою ортогональності функція  $\varphi_1(q, \alpha_1, \beta_1, \dots)$  має бути ортогональною до  $\Psi_0(q) \approx \varphi_0(q, \alpha_0^{(opt)}, \beta_0^{(opt)}, \dots)$ .

Підставляючи (16.13) у (16.9), отримуємо

$$J_1(\alpha_1, \beta_1, \dots) = \sum_{n=1} \sum_{m=1} b_n^* b_m \int \Psi_n^*(q) \hat{H}(q) \Psi_m(q) dq = \sum_{n=1} E_n |b_n|^2. \quad (16.14)$$

Повторюючи, як це було зроблено в (16.6), перетворення суми

$$\sum_{n=1} E_n |c_n|^2 \geq E_1 \sum_{n=1} |c_n|^2 = E_1 \quad (16.15)$$

і підставляючи (16.15) у (16.9), отримуємо вираз

$$E_1 = \min J_1(\alpha_1, \beta_1, \dots) = J_1(\alpha_1^{(opt)}, \beta_1^{(opt)}, \dots), \quad (16.16)$$

який доводить (16.9).

Відповідна хвильова функція першого збудженого стану має вигляд (16.12). Така послідовність операцій відповідає визначенню наступних збуджених рівнів.

3. Покажемо, що енергія  $k$ -го збудженого стану обчислюється як мінімум функціоналу

$$J_k(\alpha_k, \beta_k, \dots) = \int \varphi_k^*(q, \alpha_k, \beta_k, \dots) \hat{H}(q) \varphi_k(q, \alpha_k, \beta_k, \dots) dq \quad (16.17)$$

за  $k+1$  додаткових умов – умови нормування:

$$\int |\varphi_k(q, \alpha_k, \beta_k, \dots)|^2 dq = 1 \quad (16.18)$$

та умов ортогональності з усіма знайденими  $k$  хвильовими функціями



Мінімум цієї функції відповідає оптимальному значенню  $\alpha_1^{opt}$ , а також енергії першого збудженого стану

$$\alpha_1^{opt} = \frac{\mu\omega}{\hbar}, \quad E_1 = J_1(\alpha_1^{opt}) = \frac{3\hbar\omega}{2} \quad (16.33)$$

і хвильовій функції цього стану

$$\varphi_1(x, \alpha_0^{opt}) = \sqrt[4]{\frac{4}{\pi} \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^3} x \exp\left(-\frac{x^2}{(2\hbar/\mu\omega)}\right). \quad (16.34)$$

Видно, що отримані значення  $E_1$  та  $\varphi_1(x, \alpha_0^{opt})$  також повністю збігаються з результатами точного розрахунку (4.27) і (4.28). Це є результатом вдалого вибору пробних функцій.

## 16.2. Методи Хартрі та Хартрі – Фока для визначення хвильових функцій і рівнів енергії в самоузгодженому потенціалі багаточастинкової системи

У багаточастинковій системі існує взаємний вплив станів кожної частинки на сумарний потенціал системи, який, у свою чергу, впливає на кожну частинку. Результуюче поле називають *самоузгодженим потенціалом*. Один із шляхів пошуку такого потенціалу розглядався у статистичному методі Томаса – Фермі, де не враховувався індивідуальний стан кожної частинки. Найбільш простим методом пошуку самоузгодженого поля на основі врахування індивідуальних хвильових функцій є метод, який запропонував англійський фізик Д. Хартрі.

Розглянемо систему з  $Z$  електронів, які перебувають у полі ядра. Оператор Гамільтона такої системи має вигляд

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{i=1}^Z \Delta_i - Ze^2 \sum_{i=1}^Z \frac{1}{r_i} + \frac{e^2}{2} \sum_{i=1}^Z \sum_{j=1}^Z \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (16.35)$$

і враховує як взаємодію електронів з ядром, так і їх взаємодію між собою.

У стаціонарному стані самоузгоджений рух всіх електронів приводить до того, що в атомі на кожний електрон діє ефективно (екрановане) поле, яке характеризується потенціалом

$$\varphi(\vec{r}_i) = \frac{Ze}{r_i} + \sum_{j=1(j \neq i)}^Z \int \frac{\rho_j(\vec{r}_j)}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} dV_j. \quad (16.36)$$

У цьому виразі  $\rho_j(\vec{r}_j) = -e |\Psi(\vec{r}_j)|^2$  – густина електричного заряду, що пов'язана з просторовим розподілом  $j$ -го електрона.

Ефективний потенціал відповідає ефективному (екранованому) заряду, який визначає самоузгоджений потенціал

$$\varphi(\vec{r}_i) = \frac{Z_{\text{эф}}(r_i)e}{r_i}, \quad Z_{\text{эф}}(r_i) = Z - r_i \sum_{j=1(j \neq i)}^Z \int \frac{|\Psi(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} dV_j, \quad (16.37)$$

$$Z_{\text{эф}}(r_i \rightarrow 0) \rightarrow Z, \quad Z_{\text{эф}}(r_i \rightarrow \infty) \rightarrow 0.$$

Використовуючи (16.36), можна записати рівняння Шредінгера

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} - e^2 \sum_{j=1(j \neq i)}^Z \int \frac{|\Psi(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} dV_j \right) \Psi(\vec{r}_i) = E(i) \Psi(\vec{r}_i), \quad (16.38)$$

яке описує рух  $i$ -го електрона в самоузгодженому потенціалі атома і називається *рівнянням Хартрі*. Система цих нелінійних інтегродиференціальних рівнянь для кожного з електронів дозволяє знайти хвильову функцію та енергію всіх частинок.

Розв'язок рівняння знайдемо методом послідовних наближень. Хвильова функція нульового наближення  $\Psi^{(0)}(\vec{r}_i)$  є розв'язком рівняння (16.38), у якому не враховується взаємодія між електронами

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \Psi^{(0)}(\vec{r}_i) = E^{(0)}(i) \Psi^{(0)}(\vec{r}_i). \quad (16.39)$$

Звідси видно, що нульовому наближенню відповідають хвильові функції та значення енергії для водневоподібних атомів

$$\Psi^{(0)}(\vec{r}_i) \equiv \Psi_{nlm}(\vec{r}_i), \quad E^{(0)}(i) = -\frac{Z^2 e^4 \mu}{2\hbar^2 n^2}. \quad (16.40)$$

Хвильова функція першого наближення  $\Psi^{(1)}(\vec{r}_i)$  є розв'язком рівняння (16.38), у якому взаємодія між електронами враховується на основі функцій  $\Psi^{(0)}(\vec{r}_i)$ :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} - e^2 \sum_{j=1(j \neq i)}^Z \int \frac{|\Psi^{(0)}(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} dV_j \right) \Psi^{(1)}(\vec{r}_i) = E^{(1)}(i) \Psi^{(1)}(\vec{r}_i), \quad (16.41)$$

Відповідно хвильову функцію електрона в  $s$ -му наближенні знаходимо з рівняння

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_i - \frac{Ze^2}{r_i} - e^2 \sum_{j=1(j \neq i)}^Z \int \frac{|\Psi^{(s-1)}(\vec{r}_j)|^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|} dV_j \right) \Psi^{(s)}(\vec{r}_i) = E^{(s)} \Psi^{(s)}(\vec{r}_i). \quad (16.42)$$

Цей ітераційний процес продовжується доти, поки чергова ітерація не приведе до повторення функції  $\Psi^{(N-1)}(\vec{r}_i) = \Psi^{(N)}(\vec{r}_i)$  з наперед заданою точністю. Ця функція  $\Psi^{(N)}(\vec{r}_i) = \Psi(\vec{r}_i)$  буде кінцевим розв'язком, а відповідне їй значення енергії буде енергією  $i$ -го електрона  $E^{(N)}(i) = E_{nl}(i)$  у самоузгодженому потенціалі (16.36).

Хвильові функції  $\Psi^{(N)}(\vec{r}_i) = \Psi(\vec{r}_i)$ , які є розв'язком рівняння Хартрі, залежать від "стандартних" одночастинкових квантових чисел  $n, l, m$ , а вираз для енергії можна виразити у "стандартному" вигляді

$$E_{nl}(i) = -\frac{Z_{nl}^2 e^4 \mu}{2\hbar^2 n^2}, \quad (16.43)$$

де величина  $Z_{nl}$  визначає відмінність спектра (16.43) від спектра водневоподібних атомів. Такий ітераційний процес вимагає великих за обсягом чисельних розрахунків. Цей метод був удосконалений В.А. Фоком, який більш детально врахував наявність спіну в електронах і використав умову, згідно з якою хвильова функція всієї системи має бути антисиметричною комбінацією хвильових функцій усіх електронів у вигляді визначника Слеттера (13.48):

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_{\tilde{n}_1}(\vec{r}_1) & \Psi_{\tilde{n}_1}(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_{\tilde{n}_1}(\vec{r}_N) \\ \Psi_{\tilde{n}_2}(\vec{r}_1) & \Psi_{\tilde{n}_2}(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_{\tilde{n}_2}(\vec{r}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{\tilde{n}_N}(\vec{r}_1) & \Psi_{\tilde{n}_N}(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_{\tilde{n}_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix}.$$

Методом Хартрі – Фока вдається врахувати всі особливості структури хвильових функцій і спектра рівнів атомів.

### Контрольні запитання

1. Яка величина обчислюється за допомогою прямого варіаційного методу Рітца з більшою точністю – хвильова функція чи енергія?

2. Пояснити різницю між методом Хартрі та Хартрі – Фока.
3. Чим відрізняється стан електронів у ідеальному виродженому газі та у системі, обчисленій за допомогою методу Хартрі – Фока?

**Література:** [2], § 46.

## § 17. Стаціонарна теорія збурень

### 17.1. Стаціонарна теорія збурень за відсутності виродження квантової системи

Найпоширенішим методом наближеного розв'язку рівнянь квантової механіки є теорія збурень. Щодо ідеї цей метод є дуже простим. Припустимо, що нам відомі всі розв'язки рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_0(q) \Psi_n(q) = E_n \Psi_n(q), \quad (17.1)$$

(тобто всі власні функції  $\Psi_n(q)$ , усі власні значення енергії  $E_n$  і повна хвильова функція

$$\Psi^{(0)}(q) = \sum_n b_n \Psi_n(q) \quad (17.2)$$

для еталонної системи, яка описується оператором  $\hat{H}_0(q)$ ). Завдання полягає в тому, щоб на основі розв'язків еталонного рівняння (17.1) розробити метод розв'язання рівняння Шредінгера для збуреної системи

$$\hat{H}(q) \Psi(q) = E \Psi(q), \quad \hat{H}(q) = \hat{H}_0(q) + \hat{V}(q), \quad (17.3)$$

оператор Гамільтона якої відрізняється від еталонного оператора  $\hat{H}_0(q)$  на  $\hat{V}(q)$ . Така постановка стосується великої кількості прикладних задач. У багатьох випадках ці задачі мають ту особливість, що вплив оператора  $\hat{H}_0(q)$  на систему значно сильніший, ніж результат дії оператора  $\hat{V}(q)$ . Це з певними застереженнями можна трактувати як умову того, що оператор  $\hat{V}(q)$  є малим порівняно з  $\hat{H}_0(q)$ . Більш коректне означення такого співвідношення для операторів буде дано нижче.

Спочатку вважатимемо, що всі власні функції  $\Psi_n(q)$  є невідродженими. Розкладемо невідому функцію  $\Psi(q)$  збуреного рівняння (17.2) за  $\Psi_n(q)$ :

$$\Psi(q) = \sum_n c_n \Psi_n(q) \quad (17.4)$$

і підставимо цей розклад у (17.3), враховуючи (17.1):

$$\sum_n c_n E_n \Psi_n(q) + \sum_n \hat{V}(q) c_n \Psi_n(q) = E \sum_n c_n \Psi_n(q). \quad (17.5)$$

Такі дії відповідають формальному переходу до  $\hat{H}_0$ -представлення. Помноживши обидві частини цієї рівності на  $\Psi_m^*(q)$  і виконавши інтегрування по всій області змінної  $q$ , отримуємо

$$(E - E_m) c_m = \sum_n V_{mn} c_n, \quad (17.6)$$

де  $V_{mn} = \int \Psi_m^*(q) \hat{V}(q) \Psi_n(q) dq$  - матричний елемент енергії збурення  $\hat{V}(q)$ . Виділимо в  $V_{mn}$  малий параметр

$$V_{mn} = \lambda \tilde{V}_{mn}, \quad |\lambda| \ll 1. \quad (17.7)$$

Після цього (17.6) набуде вигляду

$$(E - E_m) c_m = \lambda \sum_n \tilde{V}_{mn} c_n, \quad (17.8)$$

зручного для застосування методу послідовних ітерацій (послідовних наближень). Розв'язки цього рівняння будемо шукати у вигляді ітераційного ряду

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} \dots, \quad (17.9)$$

$$c_n = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} \dots$$

Підстановка (17.8) у (17.7) приводить до рівняння

$$(E^{(0)} - E_m + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} \dots)(c_m^{(0)} + \lambda c_m^{(1)} + \lambda^2 c_m^{(2)} \dots) = \lambda \sum_n \tilde{V}_{mn} (c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)} + \lambda^2 c_n^{(2)} \dots). \quad (17.10)$$

У нульовому порядку за параметром  $\lambda$  з (17.10) маємо

$$(E^{(0)} - E_m) c_m^{(0)} = 0. \quad (17.11)$$

Коефіцієнт  $c_m^{(0)}$  легко знайти, якщо врахувати, що при  $\lambda = 0$  рівняння (17.1) і (17.3) збігаються, а розподіл  $c_m^{(0)}$  збігається з розподілом  $b_m$  з (17.2), який задається, виходячи із конкретних умов.

Для спрощення розрахунків оберемо  $b_m = \delta_{mk}$ , тоді розв'язок (17.8) у нульовому наближенні матиме вигляд

$$c_m^{(0)} = \delta_{mk}, \quad E^{(0)} = E_k. \quad (17.12)$$

У першому порядку за параметром  $\lambda$ , враховуючи (17.12), із (17.10) знаходимо

$$(E_k - E_m) c_m^{(1)} + E^{(1)} \delta_{mk} = \tilde{V}_{mk}. \quad (17.13)$$

Із цього рівняння при  $m = k$  маємо

$$E^{(1)} = \tilde{V}_{kk}. \quad (17.14)$$

Відповідно при  $m \neq k$  з (17.13) знаходимо

$$c_{m \neq k}^{(1)} = \frac{\tilde{V}_{mk}}{(E_k - E_m)}. \quad (17.15)$$

Умова (17.15) визначає величину  $c_m^{(1)}$  за умови, що  $m \neq k$ . Поправку до коефіцієнта  $c_k^{(1)}$  не можна знайти з (17.13) і (17.15). Для цього використаємо умову нормування функції  $\Psi(q)$  (17.4):

$$\int |\Psi(q)|^2 dq = \sum_n |c_n|^2 = |c_k|^2 + \sum_{n \neq k} |c_n|^2 = 1. \quad (17.16)$$

У першому порядку ітераційного процесу коефіцієнти мають вигляд

$$c_k = 1 + \lambda c_k^{(1)}, \quad c_{m \neq k} = \lambda c_{m \neq k}^{(1)}. \quad (17.17)$$

Враховуючи ці вирази, рівняння (17.16) набуває вигляду

$$|c_k|^2 + \sum_{n \neq k} |c_n|^2 = |1 + \lambda c_k^{(1)}|^2 + \lambda^2 \sum_{n \neq k} |c_{n \neq k}^{(1)}|^2 \rightarrow |1 + \lambda c_k^{(1)}|^2 = 1. \quad (17.18)$$

При отриманні (17.18) були відкинуті члени другого та більш високих порядків за  $\lambda$ . Із (17.18) випливає, що

$$c_k^{(1)} = 0. \quad (17.19)$$

Із рівняння (17.10) знаходимо в другому порядку за параметром  $\lambda$ :

$$(E_k - E_m) c_m^{(2)} + \tilde{V}_{kk} c_m^{(1)} + E^{(2)} \delta_{mk} = \sum_n \tilde{V}_{mn} c_n^{(1)}, \quad (17.20)$$

звідси при  $m = k$  маємо

$$E^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{|\tilde{V}_{nk}|^2}{(E_k - E_n)}. \quad (17.21)$$

Відповідно при  $m \neq k$  знаходимо

$$c_{m \neq k}^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{\tilde{V}_{mn} \tilde{V}_{nk}}{(E_k - E_m)(E_k - E_n)} - \frac{\tilde{V}_{kk} \tilde{V}_{mk}}{(E_k - E_m)^2}. \quad (17.22)$$

Поправку другого порядку  $c_k^{(2)}$  можна знайти з умови нормування

$$|c_k|^2 + \sum_{n \neq k} |c_n|^2 = 1 + \lambda^2 |c_k^{(2)}|^2 + \lambda^2 \sum_{n \neq k} \left| \frac{\tilde{V}_{nk}}{(E_k - E_n)} \right|^2 = 1. \quad (17.23)$$

Якщо вважати, що  $c_k^{(2)}$  є дійсною величиною, то

$$c_k^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \frac{|\tilde{V}_{nk}|^2}{(E_k - E_n)^2}. \quad (17.24)$$

Ітераційний процес визначення членів рядів (17.9) можна продовжити до отримання результатів із заданою похибкою.

Враховуючи отримані результати для  $E^{(i)}$  і  $c_m^{(i)}$ , можна записати остаточні вирази для енергії збуреної системи

$$E = E_k + \lambda \tilde{V}_{kk} + \sum_{n \neq k} \frac{\lambda^2 |\tilde{V}_{nk}|^2}{(E_k - E_n)} + \dots = E_k + V_{kk} + \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k - E_n)} + \dots \quad (17.25)$$

і коефіцієнтів розкладу (17.4):

$$c_k = 1 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \frac{\lambda^2 |W_{nk}|^2}{(E_k - E_n)^2} = 1 + \frac{1}{2} \sum_{n \neq k} \frac{|V_{nk}|^2}{(E_k - E_n)^2};$$

$$c_{m \neq k} = \frac{\lambda \tilde{V}_{mk}}{(E_k - E_m)} + \sum_{n \neq k} \frac{\lambda^2 \tilde{V}_{mn} \tilde{V}_{nk}}{(E_k - E_m)(E_k - E_n)} - \frac{\lambda^2 \tilde{V}_{kk} \tilde{V}_{mk}}{(E_k - E_m)^2} + \dots =$$

$$= \frac{V_{mk}}{(E_k - E_m)} + \sum_{n \neq k} \frac{V_{mn} V_{nk}}{(E_k - E_m)(E_k - E_n)} - \frac{V_{kk} V_{mk}}{(E_k - E_m)^2} + \dots, \quad (17.26)$$

які являють собою хвильову функцію системи в енергетичному представленні.

Із (17.25) випливає, що поправка другого порядку у виразі енергії для основного (найнижчого) стану з  $k = k_{\text{осн}}$  будь-якої фізичної системи з дискретним спектром рівнів завжди менша від нуля, оскільки  $(E_{k_{\text{осн}}} - E_{n > k_{\text{осн}}}) < 0$ . Це означає, що наявність слабого збурення за умови  $V_{k_{\text{осн}} k_{\text{осн}}} = 0$  призводить до зменшення повної енергії системи, якщо вона перебуває в основному стані. Такий ефект є причиною,

наприклад, сили Ван-дер-Ваальса, яка веде до взаємного притягання нейтральних атомів і молекул.

З отриманих розв'язків знаходимо необхідні умови збіжності ітераційного ряду

$$\left| \frac{V_{mk}}{(E_k - E_m)} \right| \ll 1, \quad m \neq k; \quad V_{kk} \ll E_k. \quad (17.27)$$

Із цих умов, зокрема, випливає, що розглянутий варіант теорії збурень не можна використовувати в системах, де спектр рівнів стає дуже щільним (при  $E_k - E_m \rightarrow 0$ ), що відбувається, наприклад, в атомах, коли енергія близька до потенціалу іонізації, а також у вироджених станах.

У координатному представленні хвильова функція збуреної системи (17.4) має вигляд

$$\Psi(q) = \sum_n c_n \Psi_n(q) = \Psi_k(q) + \sum_{n \neq k} \frac{V_{nk}}{(E_k - E_n)} \Psi_n(q) + \dots \quad (17.28)$$

Видно, що накладання збурення приводить до "заплутування" станів еталонної квантової системи.

## 17.2. Стаціонарна теорія збурень за наявності виродження квантової системи

Розглянемо особливості застосування теорії збурень у вироджених системах. Припустимо, що еталонна квантова система є виродженою й описується рівнянням Шредінгера

$$\hat{H}_0(q) \Psi_{n\alpha}(q) = E_n \Psi_{n\alpha}(q), \quad \alpha = 1, 2, \dots, f, \quad (17.29)$$

де  $f$  – кратність виродження. Кожному стану енергії  $E_n$  відповідає функція

$$\Psi_n(q) = \sum_{\alpha=1}^f a_{n\alpha} \Psi_{n\alpha}(q), \quad (17.30)$$

яка перебуває в суперпозиційному стані. Завдання полягає в тому, щоб на основі розв'язків еталонного рівняння (17.29) знайти розв'язок рівняння Шредінгера для збуреної системи

$$(\hat{H}_0(q) + \hat{V}(q)) \Psi(q) = E \Psi(q). \quad (17.31)$$

Введемо параметр малізми оператора збурення

$$\hat{V}(q) = \lambda \hat{\tilde{V}}(q), \quad |\lambda| \ll 1. \quad (17.32)$$

Враховуючи гоміодність загального розгляду, обмежимося першим порядком теорії збурень за параметром  $\lambda$ . Будемо шукати  $\Psi(q)$  і  $E$  у вигляді двох перших членів відповідних ітераційних рядів

$$\Psi(q) = \Psi_n(q) + \lambda \Psi^{(1)}(q), \quad E = E_n + \lambda E^{(1)}. \quad (17.33)$$

Підставляючи ці вирази в (17.31) і відкидаючи члени, пропорційні  $\lambda^2$ , а також враховуючи (17.29), отримуємо

$$\hat{H}_0(q)\Psi^{(1)}(q) + \sum_{\alpha=1}^f a_{n\alpha} \hat{V}(q)\Psi_{n\alpha}(q) = E_n \Psi^{(1)}(q) + E^{(1)} \sum_{\alpha=1}^f a_{n\alpha} \Psi_{n\alpha}(q). \quad (17.34)$$

Помножимо це рівняння на функцію  $\Psi_{n\beta}^*(q)$  і проінтегруємо по всій області існування функції, враховуючи ортогональність власних функцій  $\Psi_{n\alpha}(q)$ :

$$\int \Psi_{n\beta}^*(q) \hat{H}_0(q) \Psi^{(1)}(q) dq + \sum_{\alpha=1}^f a_{n\alpha} \tilde{V}_{n\beta, n\alpha} = E_n \int \Psi_{n\beta}^*(q) \Psi^{(1)}(q) dq + E^{(1)} a_{n\beta}, \quad (17.35)$$

де  $\tilde{V}_{n\beta, n\alpha} = \int \Psi_{n\beta}^*(q) \hat{V}(q) \Psi_{n\alpha}(q) dq = V_{n\beta, n\alpha} / \lambda$  – матричний елемент енергії збурення (17.32).

Перший доданок зліва в (17.35) легко привести, враховуючи самоспраженість оператора  $\hat{H}_0(q)$ , до вигляду

$$\int \Psi_{n\beta}^*(q) \hat{H}_0(q) \Psi^{(1)}(q) dq = \int \Psi^{(1)}(q) \hat{H}_0^*(q) \Psi_{n\beta}^*(q) dq = E_n \int \Psi^{(1)}(q) \Psi_{n\beta}^*(q) dq, \quad (17.36)$$

який відповідає першому доданку справа. Після цього (17.35) набуває вигляду системи  $f$  рівнянь:

$$\begin{cases} (E_n - E + V_{n1, n1})a_{n1} + \sum_{\alpha=1(\alpha \neq 1)}^f a_{n\alpha} V_{n1, n\alpha} = 0, \\ (E_n - E + V_{n2, n2})a_{n2} + \sum_{\alpha=1(\alpha \neq 2)}^f a_{n\alpha} V_{n2, n\alpha} = 0, \\ \dots \\ (E_n - E + V_{nf, nf})a_{nf} + \sum_{\alpha=1(\alpha \neq f)}^f a_{n\alpha} V_{nf, n\alpha} = 0 \end{cases} \quad (17.35)$$

для визначення коефіцієнтів  $a_{n\alpha}$ . Ця система має нетривіальні розв'язки  $a_{n\alpha}$  тільки у випадку, коли величини, які стоять при коефіцієнтах  $a_{n\alpha}$ , задовольняють умову

$$\begin{vmatrix} (E_n - E + V_{n1, n1}) & V_{n1, n2} & \dots & V_{n1, nf} \\ V_{n2, n1} & (E_n - E + V_{n2, n2}) & \dots & V_{n2, nf} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{nf, n1} & V_{nf, n2} & \dots & (E_n - E + V_{nf, nf}) \end{vmatrix} = 0, \quad (17.36)$$

яка приводить до рівняння

$$E^f + A_{f-1}E^{f-1} + A_{f-2}E^{f-2} + \dots + A_0 = 0 \quad (17.37)$$

для визначення системи  $E = E_{n(1)}, E_{n(2)}, \dots, E_{n(f)}$  підрівнів енергії, яким у виродженому стані відповідав єдиний рівень  $E_n$ . Частина із цих підрівнів може збігатися, що відповідає частковому зняттю виродження. Максимальна кількість розщеплених рівнів дорівнює кратності виродження  $f$  і відповідає повному зняттю виродження.

Підставляючи по черзі кожне із значень  $E_{n(g)}$  у всі рівняння системи (17.35), знаходимо повний набір коефіцієнтів  $\{a_{n\alpha(g)}\}$ , які утворюють повну хвильову функцію в енергетичному представленні, що відповідає власному значенню  $E_{n(g)}$ . У координатному представленні ця функція має вигляд

$$\Psi(q, g) = \sum_{\alpha=1}^f a_{n\alpha(g)} \Psi_{n\alpha}(q), \quad (17.30)$$

тобто є тим розв'язком збуреного рівняння (17.31), який відповідає енергії  $E_{n(g)}$ .

Таким чином, накладання збурення на вироджену систему призводить до зняття виродження, розщеплення вироджених рівнів енергії та утворення суперпозиційних станів. Оскільки причиною будь-якого виродження є наявність певної симетрії системи, то накладання збурення частково або повністю порушує цю симетрію.

### Контрольні запитання

1. Чи можна використовувати стаціонарну теорію збурень при дуже великій амплітуді збурення?

2. До яких основних ефектів приводить накладання стаціонарного збурення на квантову систему?

3. Чим принципово відрізняється дія збурення на вироджену та невироджену системи?

**Література:** [1], § 66–70; [2], § 39, 43.

## § 18. Застосування стаціонарної теорії збурень. Теорія збурень для випадку неперервного спектра. Ефект Штарка

### 18.1. Теорія збурень для вільного руху частинки

Частковим випадком вироджених станів є рух частинок у вільному просторі, якому відповідає виродження за напрямком руху. Розглянемо вплив збурення  $\hat{V}(x)$  на вільний рух частинки в одновірному випадку. Еталонна задача описується рівнянням Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \Psi_p(x)}{dx^2} = E_p \Psi_p(x) \quad (18.1)$$

і відповідає суперпозиції вироджених хвильових функцій

$$\varphi(x) = c_p \Psi_p(x) + c_{-p} \Psi_{-p}(x), \quad \Psi_{\pm p}(x) = A e^{\pm i \frac{px}{\hbar}}, \quad p > 0. \quad (18.2)$$

Згідно з розглянутим загальним методом розв'язання збуреного рівняння

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (18.3)$$

будемо шукати у вигляді (17.33):

$$\Psi(x) = c_p \Psi_p(x) + c_{-p} \Psi_{-p}(x) + \delta \Psi(x), \quad (18.4)$$

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + \delta E.$$

Після підстановки (18.4) у рівняння (18.3) і використання ортогональності функцій  $\Psi_{\pm p}(x)$  отримаємо, аналогічно (17.35), систему з двох рівнянь

$$\begin{cases} (V_{p,p} - \delta E) c_p + V_{p,-p} c_{-p} = 0, \\ V_{-p,p} c_p + (V_{-p,-p} - \delta E) c_{-p} = 0, \end{cases} \quad (18.5)$$

у якій  $V_{p',p''} = \int \Psi_{p'}^*(x) \hat{V}(x) \Psi_{p''}(x) dx$  – матричний елемент енергії збурення.

Розглянемо випадок найбільш важливого щодо практичного використання періодичного збурення

$$V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} V_n \cos nkx, \quad k = \frac{2\pi}{\Lambda}, \quad (18.6)$$

$$V_n = \frac{2}{\Lambda} \int_0^{\Lambda} V(x) \cos nkx dx \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty,$$

яке задано в інтервалі

$$L = N\Lambda, \quad N \gg 1. \quad (18.7)$$

Обчислимо недиагональні матричні елементи  $V_{p',p''}$ :

$$V_{p,-p} = \sum_{n=0}^{\infty} |A|^2 V_n \int_0^L e^{-2i \frac{px}{\hbar}} \cos(nkx) dx = \quad (18.8)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V_n}{2L} \left( \int_0^L e^{-i(\frac{2p}{\hbar} + nk)x} dx + \int_0^L e^{-i(\frac{2p}{\hbar} - nk)x} dx \right).$$

Враховуючи, що перший інтеграл у останньому виразі при  $L \gg \Lambda$  дорівнює нулю, а другий визначається співвідношенням

$$\int_0^L e^{-i(\frac{2p}{\hbar} - nk)x} dx = L \delta_{p, \frac{n\hbar k}{2}}, \quad (18.9)$$

знаходимо

$$V_{p,-p} = V_{-p,p}^* = V_{\left(\frac{2p}{\hbar k}\right)} / 2 \quad \text{при } p = \frac{n\hbar k}{2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (18.10)$$

Діагональні матричні елементи  $V_{p,p}$  визначаються співвідношеннями

$$V_{p,p} = V_{p,p}^* = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V_n}{L} \int_0^L \cos(nkx) dx = 0. \quad (18.11)$$



Враховуючи ці результати, система рівнянь (18.5) приводиться до вигляду

$$\begin{cases} \delta E c_p - V_{-p,p}^* c_{-p} = 0, \\ -V_{-p,p} c_p + \delta E c_{-p} = 0 \end{cases} \quad (18.12)$$

і має відмінні від нуля розв'язки

$$\delta E = \pm |V_{-p,p}|, \quad p = \frac{n\hbar k}{2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (18.13)$$

Ці величини визначають спектр дозовлених значень енергії частинки

$$E = \frac{p^2}{2\mu} \pm |V_{-p,p}|. \quad (18.14)$$

Унаслідок скінченності області дії енергії збурення  $L < \infty$  величина  $V_{-p,p}$  відмінна від нуля не тільки при точному виконанні умови

$p = \frac{n\hbar k}{2}$ , але й у межах інтервалу шириною  $|\Delta p| \leq \frac{n\hbar}{L}$  близько значень

$p = \frac{n\hbar k}{2}$ . Цей спектр представлено на рис. 18.1.

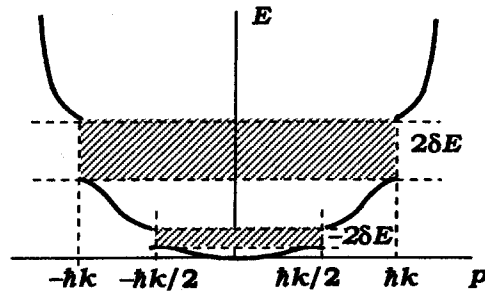


Рис. 18.1. Спектр заборонених (заштриховані області) і дозовлених (проміжки між заштрихованими областями) значень енергії вільного руху при накладанні періодичного збурення

Підставляючи по черзі величини з (18.13) у систему (18.12) отримуємо відповідні розв'язки. Якщо матричний елемент  $V_{-p,p}$  є дійсним, то при  $\delta E = V_{-p,p}$  маємо  $c_p = c_{-p}$ , чому відповідає нульове наближення збуреної функції

$$\varphi(x) = c_p (\Psi_p(x) + \Psi_{-p}(x)) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{px}{\hbar}. \quad (18.15)$$

Для розв'язку  $\Delta E = -V_{-p,p}$  знаходимо  $c_p = -c_{-p}$ , що відповідає функції

$$\varphi(x) = c_p (\Psi_p(x) - \Psi_{-p}(x)) = i \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{px}{\hbar}. \quad (18.16)$$

Наявність заборонених зон у спектрі вільного руху відповідає явищу динамічної дифракції, яка приводить до зв'язку між хвилями, які поширюються в протилежних напрямках.

## 18.2. Ефект Штарка

**18.2.1. Квадратичний ефект Штарка.** Розглянемо вплив зовнішнього однорідного електричного поля  $\vec{e} = \vec{e}_z \varepsilon$ , яке направлене вздовж осі  $z$  на атом водню, що перебуває у  $1s$ -стані. Енергія взаємодії атомного електрона з полем  $\vec{e}$  характеризується виразом

$$V(z) = -\vec{d}\vec{e} = e\varepsilon z. \quad (18.17)$$

У формулі (18.17) величина  $\vec{d} = -e\vec{r}$  є дипольним моментом атома водню. Основний стан атома водню є невідродженим і вплив електричного поля на енергію електрона описується формулою (17.25)

$$E = E_{100} + V_{100,100} + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{|V_{100,nlm}|^2}{(E_1 - E_n)} + \dots \quad (18.18)$$

Перша поправка теорії збурень відповідає матричному елементу  $V_{100,100}$ , який у декартовій системі обчислюється за допомогою формули

$$V_{100,100} = e\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{100}(x, y, z)|^2 z dx dy dz. \quad (18.19)$$

Цей матричний елемент дорівнює нулю внаслідок непарності підінтегральної функції. Наступний член ітераційного ряду (18.18) можна переписати у вигляді

$$\sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{e^2 |V_{100,nlm}|^2}{(E_1 - E_n)} + \dots = -\varepsilon^2 \alpha, \quad \alpha = \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l \frac{e^2 |z_{100,nlm}|^2}{|E_1 - E_n|} > 0. \quad (18.20)$$

Остаточний вираз для енергії атома водню в  $1s$ -стані:

$$E = E_{100} - \alpha \varepsilon^2 \quad (18.21)$$

показує, що накладання однорідного електричного поля зменшує енергію атома, причому зсув рівня пропорційний квадрату напруженості поля (квадратичний ефект Штарка).

**18.2.2. Лінійний ефект Штарка.** Збуджені стани атома водню є виродженими. Зміну стану атома за наявності зовнішнього електричного поля можна розглянути, використовуючи рівняння (17.35) і (17.36).

Розглянемо вплив поля  $\vec{\epsilon} = \vec{e}_z \epsilon$  на перший збуджений стан атома

$$\varphi(x) = \sum_{\beta=1}^4 c_{\beta} \varphi_{\beta}(x), \quad (18.22)$$

якому відповідають чотири функції (7.43):

$$\begin{aligned} \varphi_1 &\equiv \Psi_{200} = R_{20}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}, \\ \varphi_2 &\equiv \Psi_{210} = R_{21}(r)Y_{10}(\theta, \varphi) = \frac{ir}{\sqrt{32\pi a^5}} e^{-r/2a} \cos \theta, \\ \varphi_{3,4} &\equiv \Psi_{21\pm 1} = R_{21}(r)Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \frac{ir}{\sqrt{64\pi a^5}} e^{-r/2a} \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \quad (18.23)$$

Коефіцієнти  $c_{\beta}$  за наявності збурення  $V(z) = e\epsilon z$  (18.17) визначаються із системи рівнянь (17.35), яка в даному випадку має вигляд

$$\begin{aligned} (E_2 - E + V_{11})c_1 + V_{12}c_2 + V_{13}c_3 + V_{14}c_4 &= 0, \\ V_{21}c_1 + (E_2 - E + V_{22})c_2 + V_{23}c_3 + V_{24}c_4 &= 0, \\ V_{31}c_1 + V_{32}c_2 + (E_2 - E + V_{33})c_3 + V_{34}c_4 &= 0, \\ V_{41}c_1 + V_{42}c_2 + V_{43}c_3 + (E_2 - E + V_{44})c_4 &= 0. \end{aligned} \quad (18.24)$$

Спектр рівнів енергії для такої системи визначається з умови (17.36):

$$\begin{vmatrix} (E_2 - E + V_{11}) & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ V_{21} & (E_2 - E + V_{22}) & V_{23} & V_{24} \\ V_{31} & V_{32} & (E_2 - E + V_{33}) & V_{34} \\ V_{41} & V_{42} & V_{43} & (E_2 - E + V_{44}) \end{vmatrix} = 0. \quad (18.25)$$

Для розв'язку цих рівнянь необхідно знайти всі матричні елементи  $V_{nm}$ .

Переконаємось, що всі матричні елементи, окрім  $V_{12} = V_{21}^*$ , дорівнюють нулю. Для цього перейдемо від сферичної до декартової системи координат (рис. 6.1). Такий перехід відповідає замінам

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \\ \cos \theta &= \frac{z}{r}, \quad \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \frac{x \pm iy}{r}, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \end{aligned} \quad (18.26)$$

У цій системі легко обчислити матричні елементи

$$\begin{aligned} V_{11} &= \frac{(e\epsilon)}{8\pi a^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} z \left(1 - \frac{r}{2a}\right)^2 e^{-r/a} dx dy dz = 0, \\ V_{22} &= \frac{(e\epsilon)}{32\pi a^5} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} z^3 e^{-r/a} dx dy dz = 0, \\ V_{33,44} &= \frac{(e\epsilon)}{64\pi a^5} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) z e^{-r/a} dx dy dz = 0, \\ V_{13,14} &= V_{31,41}^* = \frac{(e\epsilon)}{16\sqrt{2}\pi a^4} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x \pm iy) z \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/a} dx dy dz = 0, \\ V_{23,24} &= V_{32,42}^* = \frac{(e\epsilon)}{32\sqrt{2}\pi a^5} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x \pm iy) z^2 e^{-r/a} dx dy dz = 0, \\ V_{34} &= V_{43}^* = \frac{(e\epsilon)}{64\pi a^5} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x \pm iy)^2 z e^{-r/a} dx dy dz = 0, \end{aligned} \quad (18.27)$$

виходячи з непарності відповідних підінтегральних виразів за однією з координат.

Два матричних елементи  $V_{12} = V_{21}^*$  можна знайти у сферичній системі координат

$$V_{12} = V_{21}^* = \frac{(e\epsilon)}{16\pi a^4} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) r^3 e^{-r/a} \cos^2 \theta \sin \theta dr d\theta d\varphi = -3e\epsilon a. \quad (18.28)$$

Підставляючи отримані вирази для  $V_{nm}$  у (18.25), приходимо до визначника

$$\begin{vmatrix} (E_2 - E) & -3e\epsilon a & 0 & 0 \\ -3e\epsilon a & (E_2 - E) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (E_2 - E) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (E_2 - E) \end{vmatrix} = 0 \quad (18.29)$$

і рівняння для знаходження енергії

$$(E_2 - E)^2 \{(E_2 - E)^2 - (3e\epsilon a)^2\} = 0, \quad (18.30)$$

звідси знаходимо

$$E^{(1,2)} = E_2, \quad E^{(3,4)} = E_2 \pm 3e\epsilon a. \quad (18.31)$$

Видно, що збурення у вигляді однорідного електричного поля частково знімає виродження, приводячи до розщеплення одного рівня на три. Підставляючи ці значення  $E^{(k)}$  у систему рівнянь (18.24), отримуємо коефіцієнти та суперпозиції хвильових функцій, які відповідають конкретним значенням  $E^{(k)}$ :

$$\begin{aligned} E^{(1,2)} &= E_2, \\ c_1 &= c_2 = 0, \quad \varphi^{(1,2)}(x) = c_3 \Psi_{211}(x) + c_4 \Psi_{21-1}(x); \\ E^{(3)} &= E_2 - 3\epsilon\epsilon a, \\ c_3 &= c_4 = 0, \quad c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \varphi^{(3)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{200}(x) + \Psi_{210}(x)); \\ E^{(4)} &= E_2 + 3\epsilon\epsilon a, \\ c_3 &= c_4 = 0, \quad c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \varphi^{(4)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{200}(x) - \Psi_{210}(x)). \end{aligned} \quad (18.32)$$

Загальний вигляд і структуру рівнів основного та першого збудженого станів атома водню представлено на рис. 18.2. Розглянуті процеси зсуву та розщеплення рівнів енергії під дією електричного поля називають *лінійним ефектом Штарка*.

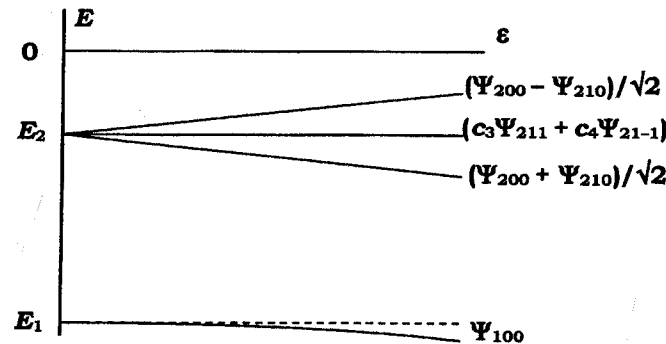


Рис. 18.2. Зміна положення та зняття виродження рівнів енергії основного та першого збудженого станів атома водню залежно від зовнішнього однорідного електричного поля  $\epsilon$

### Контрольні запитання

1. Яка фізична причина появи заборонених зон під час вільного руху частинки в періодичному потенціалі?

2. Чому накладання однорідного електричного поля на атом не приводить до повного зняття виродження електронних станів?

**Література:** [1], § 72-73; [2], § 44.

## § 19. Нестационарна теорія збурень

### 19.1. Адіабатичні та миттєві збурення

Ітераційні методи, які виявились дуже ефективними для наближеного розв'язку стаціонарних задач квантової механіки, можна з успіхом використовувати для аналізу нестационарних систем. Розглянемо еталонну систему, якій відповідає стаціонарний оператор Гамільтона  $\hat{H}_0(q)$ . У загальному випадку еволюція цієї системи описується нестационарним рівнянням Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(q,t)}{\partial t} = \hat{H}_0(q)\varphi(q,t), \quad (19.1)$$

а її стан відповідає хвильовій функції

$$\varphi(q,t) = \sum_n c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(q), \quad (19.2)$$

у якій  $\Psi_n(q)$  є розв'язком стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_0(q)\Psi_n(q) = E_n \Psi_n(q). \quad (19.3)$$

На цю систему накладено нестационарне збурення

$$\hat{V}(q,t) = \begin{cases} \hat{V}(q,t), & t_0 \leq t \leq \tau; \\ 0, & t < t_0, \quad t > \tau. \end{cases} \quad (19.4)$$

Еволюція системи описується нестационарним рівнянням Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q,t)}{\partial t} = (\hat{H}_0(q) + \hat{V}(q,t)) \Psi(q,t). \quad (19.5)$$

Будемо шукати розв'язок цього рівняння

$$\Psi(q,t) = \sum_n c_n(t) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(q) \quad (19.6)$$

методом варіації довільних сталих  $c_n(t)$ . Підставляючи (19.6) у (19.5), отримуємо рівняння

$$i\hbar \sum_n \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(q) = \sum_n c_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \hat{V}(q,t) \Psi_n(q). \quad (19.7)$$

Його можна спростити, якщо обидві частини рівняння спочатку помножити на власну функцію  $\Psi_m^*(q)$ , а потім проінтегрувати по всій області існування цієї функції:

$$i\hbar \frac{\partial c_m(t)}{\partial t} = \sum_n c_n(t) e^{i\omega_{mn}t} V_{mn}(t), \quad (19.8)$$

$$V_{mn}(t) = \int \Psi_m^*(q) \hat{V}(q,t) \Psi_n(q) dq, \quad \omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}.$$

Введемо параметр мализни енергії нестационарного збурення

$$V_{mn}(t) = \lambda \tilde{V}_{mn}(t), \quad |\lambda| \ll 1. \quad (19.9)$$

Будемо шукати розв'язок рівняння (19.8) у вигляді ітераційного ряду

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots \quad (19.10)$$

Підставляючи (19.10) і (19.9) у (19.8), отримуємо рівняння

$$i\hbar \left\{ \frac{\partial c_m^{(0)}(t)}{\partial t} + \lambda \frac{\partial c_m^{(1)}(t)}{\partial t} + \lambda^2 \frac{\partial c_m^{(2)}(t)}{\partial t} + \dots \right\} = \lambda \sum_n (c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \dots) e^{i\omega_{mn}t} \tilde{V}_{mn}(t), \quad (19.11)$$

зручне для використання ітераційного методу.

У нульовому наближенні за параметром  $\lambda$  знаходимо

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(0)}(t)}{\partial t} = 0, \quad c_m^{(0)}(t) = \text{const}. \quad (19.12)$$

Цю величину можна знайти, поставивши відповідну початкову умову. Прийmemo, що при  $t = t_0$  система перебуває в стані  $\Psi(q, t_0) = \Psi_s(q)$ , а її енергія  $E = E_s$ . Ця умова відповідає величині

$$c_m^{(0)}(t_0) = \delta_{ms}. \quad (19.13)$$

У першому наближенні за параметром  $\lambda$  з (19.11), використовуючи (19.13), отримуємо рівняння

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(1)}(t)}{\partial t} = e^{i\omega_{ms}t} \tilde{V}_{ms}(t), \quad (19.14)$$

яке має розв'язок

$$c_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt'. \quad (19.15)$$

У другому наближенні за  $\lambda$  знаходимо рівняння для визначення  $c_m^{(2)}(t)$ :

$$i\hbar \frac{\partial c_m^{(2)}(t)}{\partial t} = \sum_n c_n^{(1)} \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} = \sum_n \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}_{ns}(t') e^{i\omega_{ns}t'} dt' \right\} \tilde{V}_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} \quad (19.16)$$

і його розв'язок

$$c_m^{(2)}(t) = \sum_n \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} \tilde{V}_{ns}(t'') e^{i\omega_{ns}t''} dt'' \tilde{V}_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt'. \quad (19.17)$$

Таким чином можна знайти й розв'язок з точністю, яку визначає довільне наближення. Підставляючи отримані величини  $c_m^{(k)}(t)$  у (19.10), приходимо до остаточного розв'язку

$$c_m(t) = \delta_{ms} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt' + \sum_n \left( \frac{1}{i\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t'} V_{ns}(t'') e^{i\omega_{ns}t''} dt'' V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' + \dots \quad (19.18)$$

— це хвильова функція збуреної системи в енергетичному представленні.

У координатному представленні хвильова функція (19.6) має вигляд

$$\Psi(q,t) = \left\{ 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ss}(t') dt' + \dots \right\} e^{-i\frac{E_s t}{\hbar}} \Psi_s(q) + \sum_{n \neq s} \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt' + \dots \right\} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \Psi_n(q). \quad (19.19)$$

Із (19.18) і (19.19) видно, що у квантовій системі під дією нестационарного збурення відбувається зміна нестационарних амплітуд  $c_m(t)$  збудження квантових станів, що еквівалентно переходам системи під дією збурення між різними станами.

У більшості випадків використання ряду (19.18) обмежується найнижчим, відмінним від нуля, наближенням. Як правило, це перше наближення, для якого

$$c_m(t) = \delta_{ms} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt'. \quad (19.20)$$

Розглянемо більш детально динаміку процесів, які базуються на формулі (19.20). Відповідно до початкової умови (19.13) система до початку дії збурення перебувала в стані  $\Psi(q, t_0) = \Psi_s(q)$ , який відповідав енергії  $E = E_s$ . Ймовірність того, що система при  $t > t_0$  перебуватиме у стані, який описується хвильовою функцією  $\Psi_{m \neq s}(q)$ , дорівнює  $W_m(t) = |c_m(t)|^2$ . Оскільки стан  $\Psi_{m \neq s}(q)$  до початку дії збурення був порожній, то ймовірність перебування в цьому стані  $W_m(t)$  одночасно є ймовірністю переходу з початкового стану  $\Psi_s(q)$  у стан  $\Psi_{m \neq s}(q)$ :

$$W_{sm}(t \geq t_0) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t V_{ms}(t') e^{i\omega_{ms}t'} dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t V_{sm}(t') e^{i\omega_{sm}t'} dt' \right|^2. \quad (19.21)$$

Розглянемо кілька прикладів. Якщо нас цікавить вираз ймовірності переходу для моментів часу  $t > \tau$ , тобто після завершення дії збурення (19.4), то вираз (19.21) можна перетворити, інтегруючи по частинах

$$\begin{aligned} W_{sm}(t \geq \tau) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \left[ \frac{1}{i\omega_{sm}} V_{sm}(t') e^{i\omega_{sm}t'} \right]_0^\tau - \frac{1}{i\omega_{sm}} \int_0^\tau \frac{dV_{sm}(t')}{dt'} e^{i\omega_{sm}t'} dt' \right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2 \omega_{sm}^2} \left| \int_0^\tau \frac{dV_{sm}(t')}{dt'} e^{i\omega_{sm}t'} dt' \right|^2. \end{aligned} \quad (19.22)$$

Зупинимось на випадку, коли збурення дуже повільно змінюється протягом всього інтервалу від моменту вмикання  $t_0 = 0$  і до моменту вимикання  $\tau$ , а похідна  $dV_{sm}(t')/dt'$  є малою й можна винести з під інтегралу її усереднене значення, після чого (19.22) набуває вигляду

$$W_{sm}(t \geq \tau) = \frac{\sin^2(\omega_{sm}\tau/2)}{\hbar^2(\omega_{sm}^2/2)^2} \left| \left\langle \frac{dV_{sm}}{dt} \right\rangle \right|^2. \quad (19.23)$$

Видно, що ймовірність переходу буде пропорційною квадрату малого параметра адиабатичності

$$\left| \frac{1}{\hbar\omega_{ms}^2} \left\langle \frac{dV_{ms}}{dt'} \right\rangle \right| \ll 1. \quad (19.24)$$

Інший граничний випадок відповідає раптовій зміні енергії збурення. Нехай величина  $V_{sm}(t)$  раптово змінюється від нульового значення до свого максимуму за дуже короткий інтервал часу при  $t = t_0 = 0$ , тобто має вигляд функції Хевісайда. У цьому випадку легко

обчислюється останній інтеграл у (19.22), а вираз для ймовірності переходу набуває простого вигляду

$$W_{sm}(t \geq \tau) = \frac{|V_{sm}(0)|^2}{\hbar^2 \omega_{sm}^2}. \quad (19.25)$$

Можна знайти ще один вигляд ймовірності переходу для моментів часу  $t > \tau$ , якщо формально розширити межі інтегрування на області  $t > \tau$  та  $t < t_0$ , де збурення відсутнє

$$W_{sm}(t > \tau) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{sm}(t) e^{i\omega_{sm}t} dt \right|^2 = \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 |V_{sm}(\omega_{sm})|^2, \quad (19.26)$$

а

$$V_{sm}(\omega_{sm}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V_{sm}(t) e^{i\omega_{sm}t} dt \quad (19.27)$$

є компонентою спектра Фур'є енергії збурення на частоті переходу. Із (19.26) видно, що квантові переходи між різними станами (між різними рівнями) викликані тільки спектральними компонентами енергії збурення на частоті переходу.

## 19.2. Переходи, що викликані гармонічним збуренням квантової системи

Розглянемо переходи у квантовій системі, викликані дією дійсного гармонічного збурення

$$\hat{V}(q, t) = \hat{U}(q) e^{i\omega t} + \hat{U}^*(q) e^{-i\omega t} = 2\hat{U}(q) \cos \omega t, \quad 0 \leq t \leq \tau. \quad (19.28)$$

Підставляючи цей вираз у (19.21), отримуємо

$$\begin{aligned} W_{sm}(t > \tau) &= \frac{|U_{sm}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i(\omega_{sm} + \omega)t'} dt' + \int_0^t e^{i(\omega_{sm} - \omega)t'} dt' \right|^2 = \\ &= \frac{|U_{sm}|^2}{\hbar^2} \left| \frac{e^{i(\omega_{sm} + \omega)t} - 1}{(\omega_{sm} + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_{sm} - \omega)t} - 1}{(\omega_{sm} - \omega)} \right|^2. \end{aligned} \quad (19.29)$$

Величина

$$U_{sm}(t) = \int \Psi_s^*(q) \hat{U}(q, t) \Psi_m(q) dq \quad (19.30)$$

є матричним елементом координатної частини нестационарної енергії збурення (19.28)

Два вирази, які стоять під знаком модуля, мають резонанси при  $\omega = \pm\omega_{sm}$ . В околі кожного із цих резонансів один з виразів різко зростає відносно другого, яким при цьому можна знехтувати. Виходячи з цього, імовірність квантового переходу (19.29) можна записати у вигляді суми, яка враховує ці резонанси

$$W_{sm}(t > 0) = \frac{|U_{sm}|^2}{\hbar^2} \left\{ \left| \frac{e^{i(\omega_{sm} + \omega)t} - 1}{(\omega_{sm} + \omega)} \right|^2 + \left| \frac{e^{i(\omega_{sm} - \omega)t} - 1}{(\omega_{sm} - \omega)} \right|^2 \right\} =$$

$$= \frac{|U_{sm}|^2}{\hbar^2} \left\{ S\left(\frac{\omega_{sm} + \omega}{2}, t\right) + S\left(\frac{\omega_{sm} - \omega}{2}, t\right) \right\}, \quad (19.31)$$

$$S\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2}, t\right) = \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2}\right)^2}.$$

Функцію  $S\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2}, t\right)$  представлено на рис. 19.1.

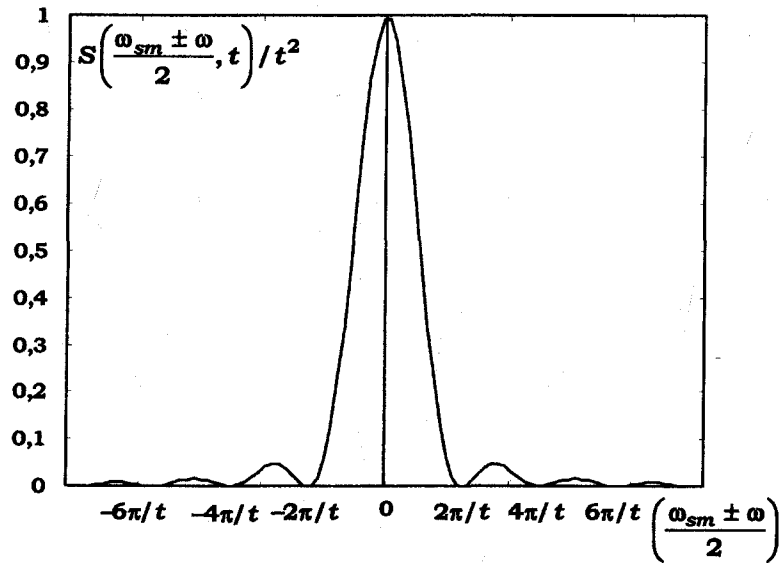


Рис. 19.1. Вигляд функції, яка визначає резонансний характер переходу між рівнями при гармонічному збуренні

З явного вигляду функції  $S\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2}, t\right)$  випливає, що основна її частина зі зростанням часу стає більш вузькою (її ширина  $4\pi/t$  у межах першого максимуму спадає зі зростанням часу), а висота максимуму при точному резонансі  $\omega = \pm\omega_{sm}$  зростає і  $S(0, t) = t^2$ . Такий характер залежності цієї функції від часу показує, що при невеликому перетворенні її можна звести до  $\delta$ -функції Дірака. Для цього введемо функцію

$$F(\alpha, t) = S(\alpha, t)/\pi t = \frac{\sin^2(\alpha t)}{\pi t \alpha^2}. \quad (19.32)$$

При зростанні  $t$  цю функцію можна апроксимувати  $\delta$ -функцією Дірака

$$F(\alpha, t)_{t \rightarrow \infty} = \delta(\alpha), \quad (19.33)$$

оскільки вона відповідає всім властивостям такої функції

$$F(0, t) = \frac{t}{\pi} \rightarrow \infty, \quad F(\alpha \neq 0, t) \sim \frac{1}{\pi t} \rightarrow 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\alpha, t) d\alpha = 1.$$

Виходячи зі співвідношення (19.33), знаходимо

$$\left| \int_0^t e^{i(\omega_{sm} \pm \omega)t'} dt' \right|^2 = S\left(\frac{\omega_{sm} \pm \omega}{2}, t\right) = 2\pi t \delta(\omega_{sm} \pm \omega). \quad (19.34)$$

Використовуючи цей результат, вираз для ймовірності переходу між рівнями можна записати у вигляді

$$W_{sm}(t > 0) =$$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar^2} |U_{sm}|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) = \frac{2\pi t}{\hbar} |U_{sm}|^2 \delta((E_s - E_m) \pm \hbar\omega). \quad (19.35)$$

Якщо розділити повну ймовірність на час дії гармонічного збурення, то отримаємо вираз для ймовірності переходу в одиницю часу

$$P_{sm}(t > 0) = \frac{W_{sm}}{t} =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2} |U_{sm}|^2 \delta(\omega_{sm} \pm \omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{sm}|^2 \delta((E_s - E_m) \pm \hbar\omega). \quad (19.36)$$

Два знаки в аргументі  $\delta$ -функції відповідають двом можливим напрямкам резонансного переходу  $E_s \pm \hbar\omega = E_m$  (поглинання або випромінювання кванта енергії).

Зауважимо, що величина ймовірності не залежить від напрямку переходу – рівність ймовірностей переходів до станів з більшою або меншою енергією квантової системи.

### Контрольні запитання

1. Який критерій використання методу раптових збурень?
2. Як можна зрозуміти наявність  $\delta$ -функції у виразі для ймовірності переходу при гармонічному збуренні, коли ця ймовірність обчислена за допомогою першого порядку теорії збурень, тобто є малою величиною?
3. Яка причина можливості збудження системи під час дії кусково-постійного збурення?

**Література:** [2], § 47–48.

## § 20. Переходи у квантовій системі під дією гармонічного резонансного збурення довільної амплітуди. Прецесія Рабі

Результати, отримані в § 19, описують переходи між рівнями квантової системи і відповідають умові, згідно з якою ймовірність цих переходів є малою. Цей висновок безпосередньо впливає з того, що проведені розрахунки базувались на формулі для ймовірності переходу між рівнями, отриманій у першому порядку теорії збурень. Такі процеси відбуваються за малої амплітуди або малої тривалості збурення.

З іншого боку, з виконанням резонансних умов ймовірність переходу за наявності гармонічного збурення зростає із часом відповідно до (19.35). Очевидно, що за досить великої тривалості дії збурення починають порушуватися передумови використання першого порядку (тобто формально розрахована ймовірність стає необґрунтовано великою).

Зупинимось на задачі про еволюцію квантової системи при обмеженій щодо тривалості дії гармонічного збурення довільної амплітуди. Розглянемо еталонну систему, якій відповідає стаціонарний

оператор Гамільтона  $\hat{H}_0(q)$ . На цю систему в момент часу  $t = 0$  накладено гармонічне збурення (19.28)

$$\hat{V}(q, t) = \hat{U}(q)e^{i\omega t} + \hat{U}^*(q)e^{-i\omega t} = 2\hat{U}(q)\cos\omega t. \quad (20.1)$$

Еволюція системи в енергетичному представленні описується системою нестационарних рівнянь Шредінгера (19.8), які для випадку гармонічного збурення (20.1) мають вигляд

$$\frac{\partial c_m(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_n c_n(t) e^{i\omega_{mn}t} U_{mn} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (20.2)$$

$$U_{mn} = \int \Psi_m^*(q) \hat{U}(q) \Psi_n(q) dq, \quad \omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}.$$

Ймовірність того, що система в момент часу  $t > 0$  буде перебувати у стані, що описується хвильовою функцією  $\Psi_{m \neq s}(q)$ , дорівнює  $W_m(t) = |c_m(t)|^2$ . При використанні апарату теорії збурень розв'язок системи рівнянь (20.2) визначався ітераційним методом, виходячи з того, що ймовірність заселення початкового рівня змінюється на невелику величину. Відкинемо це обмеження. Будемо шукати розв'язки системи (20.2) виходячи з того, що частота зовнішнього гармонічного збурення близька до однієї з частот переходів між рівнями квантової системи

$$\omega_{21} - \omega = \varepsilon, \quad |\varepsilon| \ll \omega; \quad |\omega_{nm} - \omega|_{n, m \neq 2, 1} \gg |\omega_{21} - \omega|. \quad (20.3)$$

Виділимо із системи рівнянь (20.2) складові, які відповідають резонансним членам

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} &= c_2 \frac{U_{12}}{i\hbar} (e^{-i\varepsilon t} + e^{i(\omega_{12}-\omega)t}) + \sum_{n \neq 2} c_n \frac{U_{1n}}{i\hbar} (e^{i(\omega_{1n}+\omega)t} + e^{i(\omega_{1n}-\omega)t}), \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} &= c_1 \frac{U_{21}}{i\hbar} (e^{i(\omega_{21}+\omega)t} + e^{i\varepsilon t}) + \sum_{n \neq 1} c_n \frac{U_{2n}}{i\hbar} (e^{i(\omega_{2n}+\omega)t} + e^{i(\omega_{2n}-\omega)t}), \\ \frac{\partial c_{m>2}}{\partial t} &= \sum_n c_n \frac{U_{m>2,n}}{i\hbar} (e^{i(\omega_{m>2,n}+\omega)t} + e^{i(\omega_{m>2,n}-\omega)t}). \end{aligned} \quad (20.4)$$

Для обчислення процесу резонансної взаємодії слід залишити лише ті доданки, які містять осцилюючі коефіцієнти у вигляді  $e^{\pm i\varepsilon t}$ . Можливість такого спрощення системи можна довести кількома методами; найпростіший пов'язаний з усередненням усіх членів рівнянь системи (20.4) за інтервалом часу  $\Delta t$ , що відповідає вимогам

$$\frac{1}{|\omega_{nm} - \omega|_{n,m \neq 2,1}} \ll \Delta t \ll \frac{1}{|\omega_{21} - \omega|}. \quad (20.5)$$

При такому усередненні всі швидкоосцилюючі вирази зникнуть, а складна система (20.4) перетвориться на кілька простих рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} &= c_2 \frac{U_{12}}{i\hbar} e^{-i\epsilon t}, \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} &= c_1 \frac{U_{21}}{i\hbar} e^{i\epsilon t}, \\ \frac{\partial c_{m>2}}{\partial t} &= 0. \end{aligned} \quad (20.6)$$

Із цієї системи видно, що збурення приводить до переходів у межах пари резонансних рівнів і для них умова нормування набуває вигляду

$$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1, \quad c_{n>2} = 0. \quad (20.7)$$

Якщо продиференціювати перше рівняння цієї системи й підставити в отримане співвідношення друге рівняння, то отримаємо

$$\frac{\partial^2 c_1}{\partial t^2} + i\epsilon \frac{\partial c_1}{\partial t} + \Omega_0^2 c_1 = 0, \quad \Omega_0 = \frac{|U_{21}|}{\hbar}. \quad (20.8)$$

Загальним розв'язком цього рівняння є функція

$$c_1(t) = Ae^{ir_1 t} + Be^{ir_2 t}, \quad r_{1,2} = -\frac{\epsilon}{2} \pm \Omega, \quad \Omega = \sqrt{\Omega_0^2 + \left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2}. \quad (20.9)$$

Виберемо початкову умову

$$c_1(0) = 0. \quad (20.10)$$

Із (20.9) знаходимо

$$c_1(t) = 2iAe^{-i\frac{\epsilon t}{2}} \sin \Omega t. \quad (20.11)$$

Із першого рівняння системи (20.6) знаходимо

$$c_2(t) = \frac{\partial c_1}{\partial t} \frac{i\hbar}{U_{12}} e^{i\epsilon t} = -A \frac{2\hbar}{U_{12}} \left\{ \Omega \cos \Omega t - i \frac{\epsilon}{2} \sin \Omega t \right\} e^{i\frac{\epsilon t}{2}}. \quad (20.12)$$

З умови нормування (20.7) при  $t = 0$  випливає  $|c_2(0)|^2 = 1$ . Використовуючи цей результат, з (20.11) і (20.12) знаходимо

$$\begin{aligned} |A| &= \frac{\Omega_0}{4\Omega}, \\ W_1(t) = |c_1(t)|^2 &= \frac{\Omega_0^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t = \frac{1}{1 + (\epsilon/2\Omega_0)^2} \sin^2 \left( \sqrt{\Omega_0^2 + (\epsilon/2)^2} t \right), \\ W_2(t) = |c_2(t)|^2 &= 1 - \frac{\Omega_0^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t = 1 - \frac{1}{1 + (\epsilon/2\Omega_0)^2} \sin^2 \left( \sqrt{\Omega_0^2 + (\epsilon/2)^2} t \right). \end{aligned} \quad (20.13)$$

На рис. 20.1 представлено залежність імовірностей  $W_{1,2}(t)$  заселення першого та другого рівнів від часу для різних величин відхилення  $\delta = \epsilon/2\Omega_0$  частоти збурення від точного резонансу  $\epsilon = 0$ . При точному резонансі між частотою збурення та частотою переходу між рівнями відбувається періодичний обмін процесу заселення цих рівнів. Частота переходу визначається частотою Рабі  $\Omega$ , а сам процес періодичного переходу між рівнями називається *прецесією Рабі*.

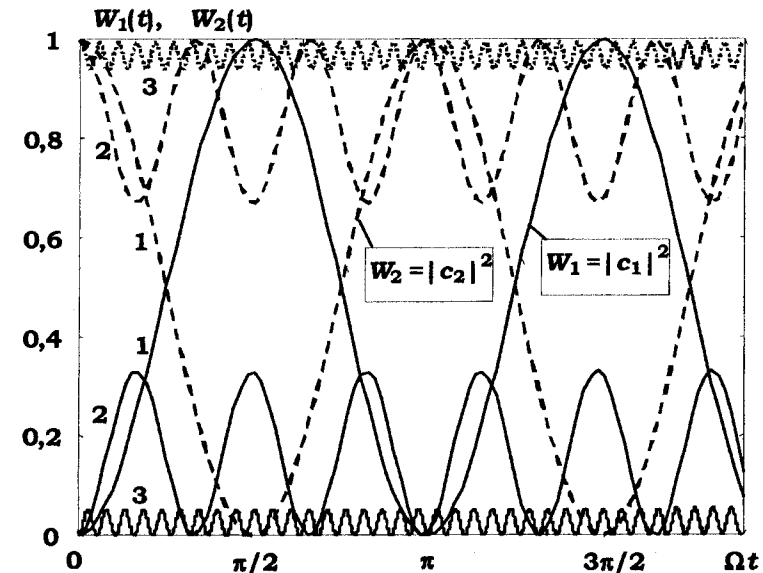


Рис. 20.1. Залежність імовірностей  $W_{1,2}(t)$  заселення першого й другого рівнів від часу та відхилення  $\delta = \epsilon/2\Omega_0$  частоти збурення від точного резонансу  $\epsilon = 0$ : 1)  $\delta = 0$ , 2)  $\delta = \sqrt{8}$ , 3)  $\delta = 20$



Видно, що зі зростанням  $|\delta|$  зменшується величина осциляцій амплітуд заселення  $|c_{1,2}(t)|^2$  і збільшується частота цих осциляцій. При дуже великому відхиленні  $|\delta| \gg 1$  періодичне збурення не приводить до зміни ймовірності  $W_{1,2}(t)$ . Це підтверджує припущення, зроблене при спрощенні загальної системи рівнянь Шредінгера (20.4) до вигляду, коли в цій системі залишилися тільки резонансні складові.

Прецесія Рабі дозволяє здійснювати повний перехід квантової системи між різними станами (рівнями енергії). Зокрема при тривалості гармонічного збурення

$$t_n = \frac{(n+1/2)\pi}{\Omega_0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (20.14)$$

відбувається повна інверсія системи. Такі процеси можуть використовуватись, наприклад, для створення інверсних станів у лазерних системах. Фазова площа імпульсу гармонічного збурення, яке здійснює такий процес, дорівнює

$$\Phi_n = \Omega_0 t_n = \frac{|U_{21}|}{\hbar} t_n = (n+1/2)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (20.15)$$

Такі імпульси називають  $\pi/2$ -імпульсом,  $3\pi/2$ -імпульсом тощо.

При тривалості імпульсу збурення

$$t_n = \frac{n\pi}{\Omega_0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (20.16)$$

відбувається повернення системи в початковий стан. Фазова площа імпульсу гармонічного збурення, яке здійснює такий процес, дорівнює

$$\Phi_n = \Omega_0 t_n = \frac{|U_{21}|}{\hbar} t_n = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (20.17)$$

Такі імпульси називають  $\pi$ -імпульсом,  $2\pi$ -імпульсом тощо. Стан системи після завершення дії таких імпульсів не змінюється й залишається ідентичним до початкового стану. Якщо ототожнити такі імпульси, наприклад, з імпульсами резонансного випромінювання, яке проходить через резонансно поглинаюче середовище в умовах точного резонансу, то здається, що будь-який  $n\pi$ -імпульс проходить крізь таке середовище таким чином, немовби процесу резонансного поглинання взагалі немає. Насправді це не так, тому що підсумковий

ефект збігу кінцевого та початкового станів проходить проміжні стадії повного циклу поетапних переходів квантової системи.

Дія імпульсів гармонічного збурення, тривалість яких відповідає умові

$$t_n = \frac{(n+1/4)\pi}{\Omega_0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (20.18)$$

приводить до формування станів з однаковою ймовірністю заселення резонансних рівнів.

Можна зазначити, що більш детальний аналіз прецесії Рабі показує, що повний перехід квантової системи між резонансними рівнями відбувається не тільки за умови постійного за амплітудою гармонічного збурення (20.1) і тривалістю (20.14) та (20.16), але й у випадку, коли амплітуда імпульсу збурення  $\Omega_0(t) = \frac{|U_{21}(t)|}{\hbar}$  змінюється із часом. Умови для таких переходів відповідають тим самим співвідношенням (20.15) і (20.17):

$(n+1/2)\pi$ -імпульс відповідає умові

$$\Phi_n = \int \Omega_0(t) dt = (n+1/2)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (20.19)$$

а  $n\pi$ -імпульс – умові

$$\Phi_n = \int \Omega_0(t) dt = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (20.20)$$

Переконаємось, що результати, отримані для випадку використання першого порядку нестационарної теорії збурень, безпосередньо впливають з (20.13). Зокрема, якщо розглянути вираз для ймовірності переходу (19.31) при точному резонансі  $\omega_{sm} \pm \omega = 0$ , то отриманий вираз

$$W_{sm}(t > 0) = \frac{|U_{sm}|^2}{\hbar^2} t^2 \quad (20.21)$$

повністю збігається з першим членом розкладу виразу (20.13) для ймовірності  $W_1(t)$  за малого часу  $t \ll 1/\Omega_0$  дії резонансного збурення. Розв'язку (20.21) на рис. 20.1 відповідає початкова ділянка залежності  $|c_1(t \ll 1/\Omega_0)|^2$ , яка має форму параболи.

**Контрольні запитання**

1. У момент часу  $t \ll \pi/4\Omega_0$  імовірності заселення обох рівнів однакові ( $W_1 = W_2$ ). Чому при подальшому збільшенні часу відбувається процес зростання  $W_1$  і зменшення  $W_2$ , а не навпаки?

2. Із формули (2013) випливає, що ймовірність  $W_1$  у початковий момент часу зростає за квадратичним законом. Як це узгоджується з результатом, який відповідає розглянутій теорії збурень (див. формулу (19.36))?

**Література:** [4], § 42.

**§ 21. Взаємодія атома з рухомою класичною зарядженою частинкою**

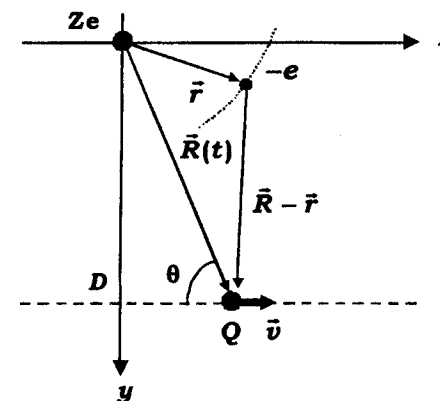
**21.1. Кулонівське збудження атома електричним полем рухомої важкої класичної зарядженої частинки**

Проілюструємо ефективність нестационарної теорії збурень для випадку взаємодії атома з електричним полем рухомої зарядженої частинки. Для спрощення аналізу вважатимемо, що частинка в процесі взаємодії з атомом передає йому малий імпульс і малу енергію. Частинку, яка рухається по прямій лінії, протягом всього часу її взаємодії з цим атомом можна вважати класичною. Детальні розрахунки показують, що зворотний вплив процесу разової взаємодії на рух важкої частинки мало змінює отримані далі співвідношення.

Розглянемо взаємодію частинки, яка має заряд  $Q$  і рухається вздовж осі  $x$  на прицільній відстані  $D$  від ядра з постійною швидкістю  $\bar{v}$ , з атомним електроном (рис. 21.1).

Поточна координата частинки та електрона в системі координат, пов'язаній з ядром, має такий вигляд:

$$\vec{R}(t) = \{vt, D, 0\}; \quad \vec{r} = \{x, y, z\}. \tag{21.1}$$



**Рис. 21.1.** Взаємне розташування рухомої частинки із зарядом  $Q$ , ядра атома та атомного електрона

Енергія взаємодії частинки з атомом

$$V(\vec{R}(t), \vec{r}) = -\frac{Qe}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} + \frac{ZeQ}{|\vec{R}(t)|} = -\frac{Qe}{\sqrt{(vt-x)^2 + (D-y)^2 + z^2}} + \frac{ZeQ}{\sqrt{(vt)^2 + D^2}} \tag{21.2}$$

залежить від часу й є причиною квантових переходів між різними станами електрона в атомі. Імовірність переходу між рівнями  $n$  і  $m$ , яким відповідають хвильові функції електрона  $\Psi_n(\vec{r})$  та  $\Psi_m(\vec{r})$ , у першому порядку теорії збурення визначається виразом (19.21), у якому початок дії збурення (21.2) дорівнює  $t_0 = -\infty$ . Формула (19.21) визначає поточну зміну ймовірності переходу між рівнями. Для практичних задач найбільш цікавою є задача про визначення повної ймовірності переходу за весь час прольоту частинки біля конкретного атома. Для такої задачі ймовірність переходу визначається формулою

$$W_{nm}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} dt \right|^2, \tag{21.3}$$

у якій  $V_{nm}(t)$  – матричний елемент оператора енергії взаємодії (21.2).

Для обчислення ймовірності спочатку спростимо вираз (21.2). Вважатимемо, що частинка пролітає за межами атома

$$\frac{|r|}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \ll 1. \tag{21.4}$$

У цьому випадку можна розкласти вираз  $V(\vec{R}(t), \vec{r})$ , обмежившись першим порядком щодо поточних координат електрона до координат частинки і поставивши у відповідність до нього оператор

$$\hat{V}(\vec{R}(t), \vec{r}) \approx -\frac{Qe}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \left( 1 + \frac{vtx + Dy}{D^2 + v^2 t^2} \right) + \frac{ZeQ}{\sqrt{(vt)^2 + D^2}}. \quad (21.5)$$

Дві компоненти енергії взаємодії, які містить вираз (21.5), відповідають двом складовим вектора напруженості електричного поля частинки. Одна, величина якої визначається координатою  $x$ , направлена паралельно вектору швидкості  $\vec{v}$ , а інша, пропорційна координаті  $y$ , перпендикулярна до вектора  $[\vec{e}_z \times \vec{v}]$ . Матричні елементи цього оператора мають вигляд

$$\begin{aligned} V_{nm}(t) &= \int \Psi_n^*(\vec{r}) \hat{V}(\vec{R}(t), \vec{r}) \Psi_m(\vec{r}) dV = \\ &= -\frac{Qe}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \left\{ \delta_{nm} + \frac{vtx_{nm} + Dy_{nm}}{D^2 + v^2 t^2} \right\} + \frac{ZeQ}{\sqrt{D^2 + v^2 t^2}} \delta_{nm}, \end{aligned} \quad (21.6)$$

де  $x_{nm}$  і  $y_{nm}$  – матричні елементи відповідних компонент координати електрона в атомі.

Вирази, які містять символ Кронекера, відмінні від нуля тільки у випадку, коли  $n = m$  (це відповідає ймовірності того, що атом, незважаючи на взаємодію з рухомою частинкою, залишиться в тому самому стані). Для випадку переходу між різними рівнями  $n \neq m$  і

$$V_{nm}(t) = -\frac{Qe}{D^3} \frac{vtx_{nm} + Dy_{nm}}{(1 + (t/T)^2)^{3/2}}, \quad T = \frac{D}{v}. \quad (21.7)$$

Величина  $T$  характеризує тривалість перебування рухомої частинки біля атома. Враховуючи (21.7), можна знайти вираз для ймовірності переходу

$$\begin{aligned} W_{nm}(t) &= \frac{(Qe)^2}{\hbar^2 D^6} |vx_{nm} J_1 + Dy_{nm} J_2|^2, \\ J_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{te^{i\omega_{nm}t}}{(1 + (t/T)^2)^{3/2}} dt = T^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{te^{i(\omega_{nm}T)\tau}}{(1 + t^2)^{3/2}} d\tau, \quad \tau = t/T, \quad (21.8) \\ J_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega_{nm}t}}{(1 + (t/T)^2)^{3/2}} dt = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(\omega_{nm}T)\tau}}{(1 + t^2)^{3/2}} d\tau. \end{aligned}$$

Інтеграли  $J_{1,2}$ , які стоять під знаком модуля в (21.8) можна виразити через спеціальні функції, але більш раціонально розглянути їх графоаналітичним методом. Величина кожного із цих інтегралів залежить від добутку  $\omega_{nm}T$ .

Якщо  $T \gg 1/\omega_{nm}$ , то підінтегральні вирази в  $J_1$  і  $J_2$  являють собою швидкоосцилюючі знакозмінні функції, період осциляцій яких значно менший, ніж характерна тривалість  $T$  великої амплітуди модулюючого множника, що стоїть перед експонентою і відображає залежність від часу енергії взаємодії частинки з електроном. У цьому випадку обидва інтеграли дуже малі й  $J_{1,2} \approx 0$ . Такий режим взаємодії називають *адиабатичною взаємодією*, він існує за виконання умови

$$D \gg v/\omega_{nm}. \quad (21.9)$$

Це відбуватиметься, якщо частинка рухатиметься на великій відстані від атома або матиме малу швидкість.

Інший граничний випадок  $T \ll 1/\omega_{nm}$  відповідає умові *імпульсної взаємодії*

$$D \ll v/\omega_{nm} \quad (21.10)$$

і справедливий під час руху частинки з великою швидкістю або на малій відстані від атома. У цьому випадку функцію  $e^{i(\omega_{nm}T)\tau}$ , яка повільно змінюється із часом, можна винести з-під знаків обох інтегралів (21.8) з аргументом  $\tau = 0$ , після чого легко знайти обидва інтеграли:

$$J_1 \approx T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tau}{(1 + \tau^2)^{3/2}} d\tau = 0, \quad (21.11)$$

$$J_2 = T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \tau^2)^{3/2}} d\tau = 2T. \quad (21.12)$$

Тепер можна записати вираз для ймовірності переходу в атомі:

$$W_{nm}(t) \approx \begin{cases} \frac{4(Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v^2 D^2} & \text{при } D \ll v/\omega_{nm}, \\ 0 & \text{при } D \gg v/\omega_{nm}. \end{cases} \quad (21.13)$$

Зробимо інтерпретацію отриманих результатів. Частина виразу для ймовірності переходу, яка залежить від матричного елемента  $x_{nm}$  і

представлена інтегралом  $J_1$  (21.11), є знакозмінною величиною й не дає внеску в імовірність переходу. Це пов'язано з повною компенсацією внеску в  $J_1$  інтервалів  $t < 0$  та  $t > 0$  і відповідає тому, що вздовжня (паралельна вектору  $\vec{v}$ ) компонента електричного поля  $E_x(t)$  рухомого заряду є знакозмінною функцією часу.

Процес результуючої взаємодії частинки з атомним електроном визначається компонентою вектора електричного поля частинки, яка перпендикулярна до вектора швидкості й направлена вздовж вектора  $\vec{e}_y \sim [\vec{e}_z \times \vec{v}]$ . Амплітуда цієї компоненти електричного поля змінюється із часом, але не змінює знак, що відображає структуру підінтегрального виразу в  $J_2$  (21.12). Це є причиною того, що ймовірність переходу в атомі забезпечується тільки матричним елементом  $y_{nm}$ .

Отримана формула (21.13) дозволяє знайти ймовірність переходу в атомі за умови, що нам відомі параметри руху зарядженої частинки (зокрема прицільна відстань  $D$  від траєкторії руху частинки до атома). Як правило, такі мікропараметри невідомі.

Більш реальною є задача про ймовірність переходу в атомі за рахунок дії однорідного за перерізом (незалежного від  $D$ ) потоку частинок  $I_Q$ , які рухаються в напрямку осі  $x$  (рис. 21.2). Якщо на атом падає направлений однорідний потік однакових заряджених частинок, то сумарна ймовірність переходу в одиницю часу визначається виразом

$$P_{nm}(v) = \frac{dW_{\Sigma}(v)}{dt} = I_Q \int_{D_{\min}}^{D_{\max}} \int_0^{2\pi} \frac{4I_Q(Qe)^2 |y_{nm}|^2 \cos^2 \varphi}{\hbar^2 v^2} D dD d\varphi \approx \frac{4\pi I_Q(Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v^2} \ln\left(\frac{D_{\max}}{D_{\min}}\right), \cos \varphi = \frac{([\vec{e}_x \times \vec{R}]\vec{e}_y)}{||\vec{e}_x \times \vec{R}||}. \quad (21.14)$$

Видно, що ймовірність  $P_{nm}(v)$  має слабку (логарифмічну) залежність від границь допустимого інтервалу прицільних відстаней. Величину  $D_{\max}$  можна прирівняти до межі між імпульсним і адиабатичним режимами взаємодії, поклавши  $D_{\max} \approx v/\omega_{nm}$ . За мінімальну величину  $D_{\min}$  можна взяти розмір атома, поклавши  $D_{\min} \approx a$ , що добре узгоджується з умовою лінеаризації оператора енергії взаємодії (21.5). Із цих умов знаходимо остаточний вираз для ймовірності переходу в атомі за рахунок взаємодії з монокінетичним потоком заряджених частинок

$$P_{nm}(v) \approx \frac{4\pi I_Q(Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v^2} \ln\left(\frac{v}{a\omega_{nm}}\right), \frac{v}{a\omega_{nm}} \geq 1. \quad (21.15)$$

Ця ймовірність переходу немонотонно залежить від швидкості частинок.

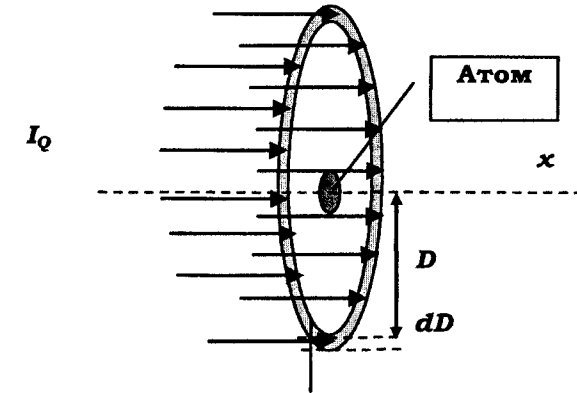


Рис. 21.2. Взаємодія потоку частинок з атомом

Вираз для  $P_{nm}(v)$  досягає максимуму при

$$v_{nm} = \sqrt{e} a \omega_{nm} \approx 1,65 a \omega_{nm} \quad (21.16)$$

і спадає як при зменшенні, так і при збільшенні швидкості. Причини такого характеру зміни  $P_{nm}(v)$  очевидні. При зменшенні швидкості відбувається перехід від імпульсної взаємодії до адиабатичної, що веде до зменшення ймовірності переходу. При збільшенні швидкості завжди буде виконуватися імпульсний режим взаємодії, але при цьому буде спадати тривалість самої взаємодії, яка характеризується величиною  $T \sim D/v$ , і відповідно спадатиме ймовірність переходу в атомі.

Можна дати геометричну інтерпретацію величині  $P_{nm}(v)$ , якщо записати співвідношення (21.15) у формі

$$P_{nm}(v) \approx I_Q \sigma_{nm}(v), \quad \sigma_{nm}(v) = \frac{4\pi(Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v^2} \ln\left(\frac{v}{a\omega_{nm}}\right) \quad (21.17)$$

і ввести переріз  $\sigma_{nm}(v)$  взаємодії частинки з атомом. Його можна ототожнити з ефективним перерізом атома щодо до процесу конкретного квантового переходу  $n \rightarrow m$  у цьому атомі. Величина цього перерізу

залежить від багатьох параметрів взаємодії й може як перевищувати геометричний переріз атома, так і бути менше від нього.

## 21.2. Гальмування важкої класичної зарядженої частинки через втрати на взаємодію з атомами

Отримані результати допускають іншу інтерпретацію й дозволяють оцінити втрати енергії частинки, яка рухається крізь середовище. Уявімо, що та сама частинка рухається крізь середовище, де атоми розподілені однорідно по об'єму з концентрацією  $n_a$ . Якщо перейти в систему координат, пов'язану з частинкою, то потік атомів  $I_a = n_a v$  налітатиме на частинку. Під час такої взаємодії відбувається збудження атомів. Повна ймовірність конкретного переходу  $n \rightarrow m$  в атомах у одиницю часу за рахунок взаємодії з однією частинкою ідентична (21.15) й описується виразом

$$P_{nm}(v) \approx \frac{4\pi n_a (Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v} \ln\left(\frac{v}{a\omega_{nm}}\right), \quad \frac{v}{a\omega_{nm}} \geq 1. \quad (21.18)$$

Якщо врахувати, що

$$P_{nm}(v) \equiv \frac{dW_{\Sigma}(v)}{dt} = \frac{dW_{\Sigma}(v)}{dx} \frac{dx}{dt} = \frac{dW_{\Sigma}(v)}{dx} v,$$

і взяти до уваги, що в таких процесах взаємодії відбувається передача енергії від частинки до атомів

$$\frac{dE_Q}{dx} = -E_{nm} \frac{dW_{\Sigma}(v)}{dx} = -\frac{E_{nm}}{v} P_{nm}(v),$$

то отримаємо остаточний вираз для питомої (на одиницю шляху) втрати частинкою енергії за рахунок збудження конкретного переходу

$$\frac{dE_Q}{dx} \approx -\frac{4\pi E_{nm} n_a (Qe)^2 |y_{nm}|^2}{\hbar^2 v^2} \ln\left(\frac{v}{a\omega_{nm}}\right). \quad (21.19)$$

Якщо врахувати всі можливі переходи в кожному з атомів, що мають заряд  $Ze$ , то можна отримати вираз для повної втрати енергії частинки на гальмування в середовищі (формула Бете – Блоха):

$$\frac{dE_Q}{dx} \approx -\frac{2\pi n_a (ZQe)^2}{m_e v^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{\langle e\phi \rangle}\right), \quad (21.20)$$

де  $\langle e\phi \rangle$  – середній потенціал іонізації атома,  $m_e$  – маса електрона.

Таким чином, гальмування заряджених частинок істотно залежить від їх швидкості. Це, зокрема, виявляється в тому, що параметри треку, який виникає в середовищі при гальмуванні заряджених частинок, будуть істотно змінюватися вздовж треку.

## 21.3. Особливості взаємодії частинки з магнітним зарядом і атомами

Система рівнянь Максвелла у вакуумі

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{H} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j}_e + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \vec{E} &= 4\pi \rho_e = 4\pi n_e q_e, \\ \nabla \cdot \vec{H} &= 0, \end{aligned} \quad (21.21)$$

є основою електродинаміки й описує різні електромагнітні явища. У вакуумі за відсутності зарядів і струмів існує певна (дуальна) симетрія між  $\vec{E}$  і  $\vec{H}$ , але в середовищі такої симетрії немає (рівняння містять електричні заряди й струми, але не мають магнітні заряди та струми). Із багатьох варіантів теорії "Великого об'єднання", яка пов'язує сильну, слабку, електромагнітну та гравітаційну взаємодії, випливає, що такі магнітні заряди (магнітні монополі) обов'язково мають існувати.

У 1931 р. П. Дірак створив теорію, яка описує взаємозв'язок елементарного електричного заряду  $e$  і гіпотетичного магнітного заряду (магнітного монополю)  $g$ . Цей зв'язок базується на взаємному квантуванні кожної з цих частинок у полі іншої й приводить до співвідношення

$$\frac{g}{e} = \frac{n \hbar c}{2 e^2} \approx 68,5 n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (21.22)$$

де  $e^2 / \hbar c \approx 1/137$  – стала тонкої структури, яка є однією з констант фізики.

Аналогічний результат можна отримати (не зовсім строго) на основі простих оцінок. Розглянемо рух електрона в однорідному магнітному полі  $H$ . Частота обертання електрона  $\omega_L$  навколо вектора  $\vec{H}$  визначається величиною

$$\omega_L \equiv \frac{v}{R} = \frac{eH}{m_e c} \quad (21.23)$$

і пов'язана з його швидкістю та радіусом колової траєкторії. Якщо застосувати до цього руху правило квантування  $m_e v R = n\hbar$ , то отримаємо співвідношення

$$\Phi_n \equiv \pi R^2 H = n \frac{\pi \hbar c}{e}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (21.24)$$

яке визначає правило квантування потоку магнітного поля. Якщо прирівняти потоки магнітного поля

$$\Phi(\Delta\Omega = 2\pi) = \int_{\Delta\Omega=2\pi} \vec{H} d\vec{S} = 2\pi g, \quad \vec{H} = g\vec{e}_r / R^2, \quad (21.25)$$

які спрямовані від гіпотетичного магнітного монополю в протилежні боки (у напрямку тілесного кута  $2\pi$ ) до виразу (21.24), то отримаємо вираз (21.22) для співвідношення елементарного електричного та магнітного зарядів. Магнітні монополи на сьогодні ще не відкриті, але їх пошук триває.

Зупинемось на особливостях взаємодії розглядуваних частинок з атомами, виходячи із системи, представленої на рис. 21.1. Як було показано, процес взаємодії частинки з атомним електроном визначається компонентою вектора електричного поля частинки, яка перпендикулярна до вектора швидкості  $\vec{v}$ . Для електричного заряду відповідна компонента напруженості електричного поля в системі на рис. 21.1 має вигляд

$$E_y = \frac{Q}{R^2} \sin\theta. \quad (21.26)$$

З іншого боку, рух магнітного заряду  $g$ , який у власній системі створює магнітне поле

$$\vec{H} = g\vec{R} / R^3, \quad (21.27)$$

у лабораторній системі, де він рухається зі швидкістю  $\vec{v}$ , також формує електричне поле

$$\vec{E} = [\vec{v} \times \vec{H}] / c = g[\vec{v} \times \vec{R}] / R^3 c, \quad (21.28)$$

у якого поперечна до вектора  $\vec{v}$  компонента визначається виразом

$$E_z = \frac{g(v/c)}{R^2} \sin\theta, \quad \sin\theta = \frac{|\vec{v} \times \vec{R}|}{vR}. \quad (21.29)$$

Із порівняння виразів (21.26) та (21.29) видно, що рухомий магнітний заряд  $g$  створює поперечне до вектора швидкості  $\vec{v}$  електричне поле такої амплітуди, як і ефективний електричний заряд  $Q_{\text{еф}} = gv/c$ . Цей результат дозволяє використати отримані формули, які описують взаємодію електричного заряду  $Q$  з атомами, для розрахунку процесу взаємодії магнітного заряду з атомами за допомогою заміни  $Q \rightarrow Q_{\text{еф}} = gv/c$ . Той факт, що поляризації цих полів різні, впливає лише на те, що в усіх формулах замість матричного елемента  $y_{nm}$  треба використовувати матричний елемент  $z_{nm}$ . Виходячи із виконаних заміни, остаточні вирази для ймовірностей взаємодії потоку магнітних зарядів з окремим атомом і водночас – одного магнітного заряду із системою атомів, можна отримати з (21.15) і (21.20). Ці вирази матимуть такий вигляд:

$$P_{nm}(v) \approx \frac{4\pi I_g (ge)^2 |z_{nm}|^2}{\hbar^2 c^2} \ln\left(\frac{v}{a\omega_{nm}}\right), \quad (21.30)$$

$$\frac{dE_g}{dx} \approx -\frac{2\pi n_a (Zge)^2}{m_e c^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{\langle |e\phi| \rangle}\right). \quad (21.31)$$

Бачимо, що ефективність взаємодії магнітних зарядів дуже слабо (за логарифмічним законом

$$\left| \frac{dE_g}{dx} \right| \sim \ln(v^2))$$

залежить від їх швидкості. Ця обставина приводить до того, що трек, який утворюється під час такої взаємодії, буде дуже повільно змінюватись (слабнути) уздовж траєкторії руху. Це суттєво відрізняє гальмування гіпотетичних магнітних зарядів від аналогічного гальмування електричних зарядів, для яких ефективність взаємодії дуже сильно зростає (за законом  $\left| \frac{dE_Q}{dx} \right| \sim \frac{\ln(v^2)}{v^2}$ ) при зменшенні їх швидкості, що може бути покладено в основу принципу їх ідентифікації.

### Контрольні запитання

1. Пояснити, чому процес результуючої взаємодії частинки з атомним електроном визначається лише компонентою вектора електричного поля частинки, яка перпендикулярна до вектора швидкості.
2. Чим пояснити наявність оптимальної швидкості, за якої ймовірність збудження атома полем рухомої частинки буде найбільшою?
3. Чому ефективність взаємодії рухомих магнітних зарядів з речовиною дуже слабо залежить від їх швидкості?

*Література:* [3], § 75.

*Додаткова література:* [III].

## Розділ VII

### ОСОБЛИВОСТІ ВЗАЄМОДІЇ КВАНТОВИХ СИСТЕМ З ЕЛЕКТРОМАГНІТНИМИ ХВИЛЯМИ

#### § 22. Взаємодія квантових систем з електромагнітними хвилями

##### 22.1. Переходи у квантовій системі, викликані випромінюванням з довільною довжиною хвилі

Застосуємо наведену теорію переходів у квантовій системі, викликаних нестационарним збуренням, до задачі про переходи, стимульовані електромагнітним випромінюванням. Нагадаємо деякі характеристики, які визначають властивості електромагнітних хвиль. Будемо описувати електромагнітне поле у вакуумі за допомогою вектор-потенціалу

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = A_0 \vec{e}_k \cos(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad (22.1)$$

де  $A_0$  – амплітуда вектор-потенціалу, а  $\vec{e}_k$  – одиничний вектор поляризації. Електромагнітне поле (22.1) у вакуумі є поперечним і

$$\nabla \vec{A}(\vec{r}, t) \sim (\vec{k}\vec{e}_k) = 0. \quad (22.2)$$

Величина  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  визначає напруженість електричного та магнітного полів

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{E}_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad \vec{E}_0 = \vec{e}_k A_0 \frac{\omega}{c}, \\ \vec{H}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0 \sin(\omega t - \vec{k}\vec{r}), \quad \vec{H}_0 = [\vec{e}_k \times \vec{k}], \end{aligned} \quad (22.3)$$

де величина  $\vec{E}_0$  – амплітуда напруженості електричного поля, а  $\vec{H}_0$  – магнітного поля. Амплітуду  $A_0$  можна виразити через енергетичну інтенсивність електромагнітної хвилі, яку слід розуміти як абсолютну величину усередненого за періодом коливань  $T = 2\pi/\omega$  вектора, Умова – Пойнтінга:

$$J_0 = \langle [\vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{H}(\vec{r}, t)] \rangle_T = \frac{A_0^2 \omega^2}{8\pi c}, \quad A_0 = \frac{\sqrt{8\pi c J_0}}{\omega}. \quad (22.4)$$

Для монохроматичних хвиль крім енергетичної інтенсивності електромагнітної хвилі  $J_0$ , яка відповідає енергії поля, що пройшла за одиницю часу через одиничний переріз, можна ввести потокову інтенсивність хвилі

$$J_0 = \hbar \omega I_0, \quad (22.5)$$

яка визначає кількість квантів даної частоти  $\omega$ , що пройшли за одиницю часу через цей одиничний переріз.

Оператор Гамільтона квантової системи з багатьма електронами при накладанні зовнішнього електромагнітного поля (22.1) має вигляд

$$\hat{H} = \sum_{\beta} \left( \frac{\hat{p}_{\beta} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}_{\beta}, t)}{2\mu} \right)^2 + U = \sum_{\beta} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\beta} + V_1(\vec{r}_{\beta}, t) + V_2(\vec{r}_{\beta}, t) \right\} + U, \quad (22.6)$$

$$\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t) = \frac{e}{\mu c} \vec{A}(\vec{r}_{\beta}, t) \hat{p}_{\beta}, \quad \hat{V}_2(\vec{r}_{\beta}, t) = \frac{e^2 A^2(\vec{r}_{\beta}, t)}{2\mu c^2},$$

аналогічний (12.2), і містить два доданки  $\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t)$  та  $\hat{V}_2(\vec{r}_{\beta}, t)$ , які по-різному залежать від цього поля.

Очевидно, що за малого значення  $A_0$  найбільш важливим буде вираз  $\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t)$ , пропорційний  $A_0$ , а за великої амплітуди – вираз  $\hat{V}_2(\vec{r}_{\beta}, t)$ , пропорційний  $A_0^2$ . Визначимо граничну амплітуду, за якої ці доданки будуть співрозмірними між собою. Для оцінки можна використати значення  $p = \mu e^2 / \hbar$ , яке випливає з умови квантування Бора. Прирів-

нюючи класичні аналоги  $V_1(\vec{r}_{\beta}, t) = V_2(\vec{r}_{\beta}, t)$ , отримуємо оцінку для граничної інтенсивності електромагнітного поля

$$J_{0(\text{гр})} \approx \frac{\mu^2 \omega^2 e^2 c}{2\pi \hbar^2}. \quad (22.7)$$

Зокрема при частоті  $\omega \approx 2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ , яка відповідає видимому діапазону, гранична інтенсивність дорівнює дуже великому значенню  $J_{0(\text{гр})} \approx 10^{15} \text{ Вт/см}^2$ , яке досягається тільки в кращих лазерних системах з використанням спеціальних методів компресії (стискання) лазерних імпульсів. Оскільки в таких полях майже завжди відбувається повна іонізація атомів, то для них задача про вплив змінного електромагнітного поля на ймовірність переходів між атомними рівнями не має змісту. Виходячи з цього, обмежимося аналізом взаємодії з квантовими системами більш слабких електромагнітних хвиль з  $J_0 \ll J_{0(\text{гр})}$ , залишаючи в операторі Гамільтона доданок

$$\hat{V}_1(\vec{r}_{\beta}, t) \equiv \hat{V}(\vec{r}_{\beta}, t) = \frac{eA_0}{2\mu c} \left\{ e^{i(\omega t - \vec{k}\vec{r}_{\beta})} + e^{-i(\omega t - \vec{k}\vec{r}_{\beta})} \right\} (\vec{e}_k \hat{p}_{\beta}), \quad (22.8)$$

який відповідає енергії нестационарного збурення.

Розглянемо вплив збурення на атом. Ймовірність переходу одного електрона в атомі з  $n$ -го на  $m$ -й рівень під дією електромагнітного поля, яке вмикається в момент часу  $t = 0$ , описується формулою

$$\begin{aligned} W_{nm} &= \left| \frac{1}{\hbar} \int_0^t V_{nm}(t') e^{i\omega_{nm} t'} dt' \right|^2 = \frac{e^2 A_0^2}{4\hbar^2 \mu^2 c^2} \left| \int_0^t e^{i(\omega_{nm} + \omega)t'} dt' \int \Psi_n^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_m dv + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t e^{i(\omega_{nm} - \omega)t'} dt' \int \Psi_n^* e^{i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_m dv \right|^2. \end{aligned} \quad (22.9)$$

Використовуючи співвідношення (19.34), можна записати в остаточному вигляді вирази для повної ймовірності переходу  $W_{nm}(t)$  та ймовірності переходу за одиницю часу  $P_{nm}$ :

$$\begin{aligned} W_{nm}(t) &= \frac{\pi e^2 A_0^2 t}{2\hbar^2 \mu^2 c^2} |B_{nm}|^2 \delta(\omega_{nm} \pm \omega) = \frac{4\pi^2 e^2 J_0 t}{\hbar^2 \mu^2 \omega^2 c} |B_{nm}|^2 \delta(\omega_{nm} \pm \omega), \\ P_{nm} &= \frac{4e^2 J_0 \pi^2}{\hbar^2 \mu^2 \omega^2 c} \delta(\omega_{nm} \pm \omega) |B_{nm}|^2, \end{aligned} \quad (22.10)$$

$$B_{nm} = \int \Psi_n^*(\vec{r}) e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_m(\vec{r}) dv.$$



У цих виразах імовірності вимушених переходів залежать від матричного елемента  $B_{nm}$ . Подальший аналіз можна зробити за виконання певних умов, які розглянемо далі.

## 22.2. Дипольне наближення при взаємодії електромагнітного випромінювання з атомними системами

Більш детальне обчислення виразу (22.10) можна провести, якщо врахувати співвідношення між типовими розмірами конкретних атомних систем і довжиною електромагнітної хвилі  $\lambda = 2\pi c/\omega$ , яке визначає фазові множники  $kr = 2\pi r/\lambda$  у формулі (22.10):

а) для квантових переходів за участю зовнішніх атомних електронів, які локалізовані в області  $r \leq 10^{-8}$  см, типовою є довжина хвилі  $\lambda \geq 0,1 - 10$  мк, що приводить до оцінки  $kr \ll 1$ ;

б) для квантових переходів у важких атомах за участю внутрішніх атомних електронів, які локалізовані в області  $r \leq 10^{-9} - 10^{-10}$  см, типовою є довжина хвилі  $\lambda \geq 1 - 10 \text{ \AA}$ , що приводить до тієї самої оцінки  $kr \ll 1$ ;

в) в ядерних системах довжина хвилі  $\lambda \approx 10^{-2} - 1 \text{ \AA}$  значно менша, ніж у атомах, але їх розмір не перевищує  $r \approx (3 - 7) \cdot 10^{-13}$  см, що відповідає  $kr \ll 1$ . Таке саме співвідношення відповідає інфрачервоному та мікрохвильовому випромінюванню або поглинанню в молекулах.

З погляду електродинаміки молекули, атоми та ядра є дуже неефективними випромінювачами, оскільки в них  $r \ll \lambda$  (нагадаємо, що розмір ефективної антени має задовольняти умову  $r \approx \lambda$ ). Виходячи з отриманої оцінки  $kr \ll 1$ , можна спростити вираз для  $B_{nm}$ , розклавши експоненту в підінтегральному співвідношенні (22.10):

$$e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} \approx 1 \mp i\vec{k}\vec{r} - \frac{(\vec{k}\vec{r})^2}{2} + \dots \quad (22.11)$$

та обмежившись першим неznикаючим членом. Якщо залишити в правій частині розкладу (22.11) одиницю, то отримаємо наближення, яке називають *дипольним*. У цьому випадку маємо

$$B_{nm} = \int \Psi_n^*(\vec{r})(\vec{e}_k \hat{p})\Psi_m(\vec{r})dV. \quad (22.12)$$

Цей інтеграл можна додатково спростити, якщо замінити оператор імпульсу  $\vec{p}$  еквівалентним виразом  $\vec{p} = \mu \frac{d\vec{r}}{dt}$  (6.36), у якому похідна визначається з рівняння руху (6.33) для оператора координати  $\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{r}\hat{H}]$ . Використовуючи отриману заміну

$$\hat{p} = \frac{\mu}{i\hbar}[\vec{r}\hat{H}] \quad (22.13)$$

і стаціонарне рівняння Шредінгера для незбуреної системи

$$\hat{H}\Psi_m = E_m \Psi_m, \quad (22.14)$$

а також умову самоспряженості оператора Гамільтона, нескладно обчислити матричний елемент (22.10):

$$\begin{aligned} B_{nm} &= \frac{\mu \vec{e}_k}{i\hbar} \left\{ \int \Psi_n^*(\vec{r})\vec{r}\hat{H}\Psi_m(\vec{r})dV - \int \Psi_n^*(\vec{r})\hat{H}\vec{r}\Psi_m(\vec{r})dV \right\} = \\ &= -i\mu\omega_{nm}(\vec{e}_k \vec{r}_{nm}), \quad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \end{aligned} \quad (22.15)$$

Підставляючи вираз  $B_{nm}$  (22.15) у (22.10), знаходимо

$$P_{nm} = \frac{4\pi^2 J_0}{\hbar c} |(\vec{e}_k \vec{d}_{nm})|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega), \quad (22.16)$$

де  $\vec{d}_{nm} = e\vec{r}_{nm}$  – матричний елемент електричного дипольного моменту атома, а самі вирази визначають імовірності переходу у квантовій системі (атомі, молекулі або ядрі) у дипольному наближенні.

При випадковій орієнтації дипольного моменту атома відносно вектора поляризації електромагнітної хвилі необхідно провести усереднення

$$\langle |(\vec{e}_k \vec{d}_{nm})|^2 \rangle = |\vec{d}_{nm}|^2 \langle \cos^2 \theta \rangle = |\vec{d}_{nm}|^2 \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\varphi = \frac{|\vec{d}_{nm}|^2}{3},$$

тоді (22.16) набуває такого вигляду:

$$\langle P_{nm} \rangle = \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar c} |\vec{d}_{nm}|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega). \quad (22.17)$$

Переходи, імовірність яких визначається матричним елементом електричного дипольного моменту атома, називають *дипольними* і позначаються як переходи типу  $E1$ .

Вирази (22.16) і (22.17) характеризують імовірність переходу між не виродженими станами. Якщо початковий  $n$  і кінцевий  $m$  стани вимушеного переходу є виродженими з кратністю  $g_n$  та  $g_m$ , то формула (22.17) характеризує ймовірність парціального переходу між конкретними станами  $\Psi_{n\alpha}(\vec{r})$  і  $\Psi_{m\beta}(\vec{r})$ , які відповідають значенням енергії  $E_n$  та  $E_m$ , і має вигляд

$$\langle P_{n\alpha, m\beta} \rangle = \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar c} |(\vec{e}_k \vec{d}_{n\alpha, m\beta})|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega), \quad (22.18)$$

де

$$\vec{d}_{n\alpha, m\beta} = e \int \Psi_{n\alpha}^*(\vec{r}) \vec{r} \Psi_{m\beta}(\vec{r}) dv \quad (22.19)$$

є матричним елементом дипольного моменту атома для конкретного парціального переходу між станами  $\Psi_{n\alpha}(\vec{r})$  і  $\Psi_{m\beta}(\vec{r})$ .

Повна ймовірність переходу  $n \rightarrow m$  визначається при усередненні (22.18) за початковим станом  $n$  і підсумовуванням за кінцевим станом  $m$ :

$$\langle P_{nm} \rangle = \sum_{\beta=1}^{g_m} \sum_{\alpha=1}^{g_n} \frac{1}{f_n} \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar c} |\vec{d}_{n\alpha, m\beta}|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega). \quad (22.20)$$

Визначимо ймовірність зворотного переходу  $m \rightarrow n$ . Її можна знайти при усередненні (22.18) за станом  $m$  і підсумовуванням за  $n$ , а саме:

$$\langle P_{mn} \rangle = \sum_{\alpha=1}^{g_n} \sum_{\beta=1}^{g_m} \frac{1}{f_m} \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar c} |\vec{d}_{m\beta, n\alpha}|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega). \quad (22.21)$$

Частина цих переходів зображено на рис. 22.1.

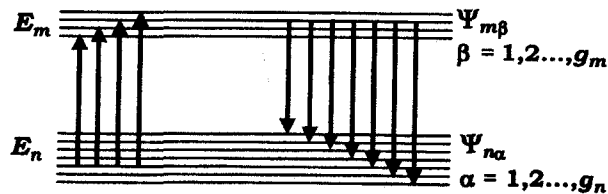


Рис. 22.1. Вимушені переходи у виродженій системі

Порівнюючи формули (22.20) і (22.21), а також враховуючи, що для ермітових операторів виконується очевидна умова  $|\vec{d}_{n\alpha, m\beta}|^2 = |\vec{d}_{m\beta, n\alpha}|^2$ , приходимо до важливого співвідношення

$$P_{nm} g_n = P_{mn} g_m, \quad \langle P_{nm} \rangle g_n = \langle P_{mn} \rangle g_m, \quad (22.22)$$

яке показує, що для вироджених станів імовірності прямого та зворотного переходів між рівнями можуть бути різними. Цей результат має велике значення, наприклад, при створенні активного середовища для лазерних систем. Представимо, що електромагнітна хвиля з інтенсивністю  $J_0$  падає на середовище, у якому концентрація атомів у стані з енергією  $E_n$  дорівнює  $n_n$ , а в стані з  $E_m > E_n$  дорівнює  $n_m$ . Зміна інтенсивності цієї хвилі у шарі товщиною  $dx$  визначається умовою балансу

$$dJ_0 = P_{mn} n_m dx - P_{nm} n_n dx = P_{nm} (n_m \frac{g_n}{g_m} - n_n) dx. \quad (22.23)$$

Із (22.23) випливає, що для забезпечення підсилення  $dJ_0 > 0$  необхідне виконання порогової умови

$$n_m \frac{g_n}{g_m} - n_n > 0. \quad (22.24)$$

У не виродженій системі умова (22.24) зводиться до умови інверсії населеності радіаційного переходу  $n_m > n_n$ .

У виродженій системі умова підсилення залежить від співвідношення  $g_n/g_m$  кратностей виродження станів, між якими відбувається стимульований перехід. Якщо  $g_n/g_m > 1$ , то підсилення можливе в середовищі без інверсії  $n_{m(\text{пор})} = n_n \frac{g_m}{g_n} < n_n$ , що полегшує вимогу до системи збудження активного середовища лазера.

У протилежному випадку,  $g_n/g_m < 1$ , ці умови будуть ускладненими

$$n_{m(\text{пор})} = n_n \frac{g_m}{g_n} > n_n.$$

### Контрольні запитання

1. Чи зміниться умова дипольного наближення, якщо середовище, яке оточує атом, буде заповнене діелектриком з діелектричною проникністю, відмінної від одиниці?

2. Пояснити, чому кратність виродження квантових станів впливає на умову вимушеного (лазерного) підсилення при переході між цими станами.

**Література:** [1], § 87; [2], § 53.

## § 23. Правила відбору для поглинання та випромінювання світла в атомах і квантових системах. Мультипольні переходи

### 23.1. Правила відбору для дипольних переходів у атомах

Процес взаємодії електромагнітного випромінювання з атомними системами, який веде до переходів між різними станами, описується першим порядком нестационарної теорії збурень. Імовірність такого процесу, який супроводжується переходом  $\Psi_\alpha(\vec{r}) \rightarrow \Psi_\beta(\vec{r})$ , визначається формулою (22.10):

$$P_{\alpha\beta} = \frac{4e^2 J_0 \pi^2}{\hbar \mu^2 \omega^2 c} \delta(E_\alpha - E_\beta \pm \hbar\omega) |B_{\alpha\beta}|^2, B_{\alpha\beta} = \int \Psi_\alpha^*(\vec{r}) e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} (\vec{e}_k \hat{p}) \Psi_\beta(\vec{r}) dV,$$

яка в дипольному наближенні (при заміні  $e^{\mp i\vec{k}\vec{r}} \approx 1$ ) спрощується й набуває вигляду (22.15), (22.16):

$$B_{\alpha\beta} = -i\mu\omega_{\alpha\beta} (\vec{e}_k \vec{r}_{\alpha\beta}),$$

$$P_{\alpha\beta} = \frac{4\pi^2 J_0}{\hbar c} |(\vec{e}_k \vec{d}_{\alpha\beta})|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta \pm \hbar\omega),$$

$$\langle P_{\alpha\beta} \rangle = \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar c} |\vec{d}_{\alpha\beta}|^2 \delta(E_\alpha - E_\beta \pm \hbar\omega).$$

Бачимо, що перехід у атомі під дією електромагнітного випромінювання буде можливим тільки між тими станами, для яких  $B_{\alpha\beta} \neq 0$ .

У дипольному наближенні ця умова має вигляд  $\vec{d}_{\alpha\beta} \neq 0$ .

Зв'язки між квантовими числами початкового й кінцевого станів, де відповідні матричні елементи  $B_{\alpha\beta}$  та  $\vec{d}_{\alpha\beta} = e\vec{r}_{\alpha\beta}$  відмінні від нуля, називається *правилами відбору* для відповідних переходів. Спочатку розглянемо правила відбору для дипольних переходів, використовуючи хвильові функції атома

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (23.1)$$

Для зручності розрахунків у сферичній системі розглянемо матричні елементи координат

$$\begin{cases} \xi = x + iy = r \sin \theta e^{i\varphi}, \\ \eta = x - iy = r \sin \theta e^{-i\varphi}, \\ z = r \cos \theta, \end{cases} \quad (23.2)$$

з яких легко отримати відповідні декартові компоненти вектора  $\vec{r}$ . Далі будемо використовувати співвідношення, які визначають властивості приєднаних поліномів Ерміта:

$$\int_{-1}^1 P_l^m(t) P_l^{m'}(t) dt = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (23.3, a)$$

$$t P_l^m(t) = a_{lm} P_{l+1}^m + b_{lm} P_{l-1}^m, \quad (23.3, б)$$

$$\sqrt{1-t^2} P_l^m = \alpha_{lm} P_{l-1}^{m-1}(t) + \beta_{lm} P_{l+1}^{m-1}(t), \quad (23.3, в)$$

де величини  $a_{lm}, b_{lm}, \alpha_{lm}, \beta_{lm}$  – параметри, що не залежать від змінної.

Знайдемо матричні елементи окремих компонент координат (23.2), починаючи з  $\xi_{nlm, n'l'm'}$ :

$$\begin{aligned} \xi_{nlm, n'l'm'} &= \int \Psi_{nlm}^*(\vec{r}) \xi \Psi_{n'l'm'}(\vec{r}) dV = \\ &= \int_0^\infty R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^3 dr \int_0^\pi P_l^m(\cos \theta) \sin \theta P_{l'}^{m'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(-m+1+m')\varphi} d\varphi. \end{aligned} \quad (23.4)$$

Останній інтеграл у цьому виразі має вигляд

$$\int_0^{2\pi} e^{i(-m+1+m')\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m, m'+1}. \quad (23.5)$$

Переходячи в (23.4) до нової змінної  $\cos \theta = t$  і використовуючи (23.5), а також рекурентне співвідношення (23.3, в) та умову ортогональності поліномів Ерміта (23.3, а), отримуємо

$$\begin{aligned} \xi_{nlm,n'l'm'} &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \int_{-1}^1 P_l^m(t)\sqrt{1-t^2} P_{l'}^{m-1}(t) dt = \\ &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \left\{ \alpha_{lm} \int_{-1}^1 P_{l-1}^{m-1}(t)P_l^{m-1}(t) dt + \beta_{lm} \int_{-1}^1 P_{l+1}^{m-1}(t)P_l^{m-1}(t) dt \right\} \delta_{m,m'+1} = \\ &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \{ \alpha_{lm} \delta_{l,l'+1} + \beta_{lm} \delta_{l,l'-1} \} \delta_{m,m'+1}. \end{aligned} \quad (23.6)$$

Аналогічно знаходимо матричний елемент  $\eta_{nlm,n'l'm'}$ :

$$\begin{aligned} \eta_{nlm,n'l'm'} &= \int \Psi_{nlm}^*(\vec{r}) \eta \Psi_{n'l'm'}(\vec{r}) dv = \\ &= \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \int_{-1}^1 P_l^m(t)\sqrt{1-t^2} P_{l'}^{m'}(t) dt \int_0^{2\pi} e^{i(-m-1+m')\varphi} d\varphi. \end{aligned} \quad (23.7)$$

Останній інтеграл має вигляд

$$\int_0^{2\pi} e^{i(-m-1+m')\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m,m'-1}. \quad (23.8)$$

Використовуючи (23.8), (23.3, в) і (23.3, а), отримуємо

$$\begin{aligned} \eta_{nlm,n'l'm'} &= \\ &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \left\{ \alpha_{l'm} \int_{-1}^1 P_{l-1}^m(t)P_l^m(t) dt + \beta_{l'm} \int_{-1}^1 P_{l+1}^m(t)P_l^m(t) dt \right\} \delta_{m,m'-1} = \\ &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \{ \alpha_{l'm} \delta_{l,l'+1} + \beta_{l'm} \delta_{l,l'-1} \} \delta_{m,m'+1}. \end{aligned} \quad (23.9)$$

Знайдемо матричний елемент  $z_{nlm,n'l'm'}$ :

$$z_{nlm,n'l'm'} = \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \int_{-1}^1 P_l^m(t)tP_{l'}^{m'}(t) dt \int_0^{2\pi} e^{i(-m+m')\varphi} d\varphi. \quad (23.10)$$

Останній інтеграл у цьому співвідношенні має вигляд

$$\int_0^{2\pi} e^{i(-m+m')\varphi} d\varphi = 2\pi \delta_{m,m'}. \quad (23.11)$$

Використовуючи (23.11), (23.3, б) і (23.3, а), знаходимо

$$\begin{aligned} z_{nlm,n'l'm'} &= \\ &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \left\{ a_{lm} \int_{-1}^1 P_{l+1}^m(t)P_l^m(t) dt + b_{lm} \int_{-1}^1 P_{l-1}^m(t)P_l^m(t) dt \right\} \delta_{m,m'} = \\ &= 2\pi \int_0^\infty R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)r^3 dr \{ a_{lm} \delta_{l,l'-1} + b_{lm} \delta_{l,l'+1} \} \delta_{m,m'}. \end{aligned} \quad (23.12)$$

З отриманих результатів (23.5), (23.6), (23.8), (23.9), (23.11) та (23.12) знаходимо правила відбору для орбітального та магнітного квантових чисел для координат (23.2) у дипольному наближенні

$$\begin{aligned} \xi_{nlm,n'l'm'}: l' &= l \pm 1, m' = m + 1, \\ \eta_{nlm,n'l'm'}: l' &= l \pm 1, m' = m - 1, \\ z_{nlm,n'l'm'}: l' &= l \pm 1, m' = m. \end{aligned} \quad (23.13)$$

Для головного квантового числа правил відбору не існує. Враховуючи зв'язок (23.2) координат з декартовими координатами, знаходимо остаточні правила відбору для дипольних переходів:

$$\begin{aligned} x_{nlm,n'l'm'} &= \frac{\xi_{nlm,n'l'm'} + \eta_{nlm,n'l'm'}}{2}: l' = l \pm 1, m' = m \pm 1, \\ y_{nlm,n'l'm'} &= \frac{\xi_{nlm,n'l'm'} - \eta_{nlm,n'l'm'}}{2i}: l' = l \pm 1, m' = m \pm 1, \\ z_{nlm,n'l'm'}: l' &= l \pm 1, m' = m. \end{aligned} \quad (23.14)$$

## 23.2. Правила відбору для переходів вищої мультипольності

Отримані правила відбору визначають ті переходи між різними станами, для яких матричний елемент дипольного моменту  $\vec{r}_{\alpha\beta}$  відмінний від нуля. Якщо для конкретного переходу між рівнями ця умова не виконується, то такий перехід вважається забороненим. Проте ця заборона не є повною, оскільки сам аналіз виразу для ймовірності радіаційного переходу (22.10)

$$P_{\alpha\beta} = \frac{4e^2 J_0 \pi^2}{\hbar \mu^2 \omega^2 c} \delta(E_\alpha - E_\beta \pm \hbar \omega) |B_{\alpha\beta}|^2, \quad B_{\alpha\beta} = \int \Psi_\alpha^*(\vec{r}) e^{\mp i \vec{k} \cdot \vec{r}} (\vec{e}_k \cdot \vec{p}) \Psi_\beta(\vec{r}) dv$$

базується на використанні дипольного наближення  $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}} \approx 1$ , яке веде до спрощеного виразу (22.15) для матричного елементу

$$B_{\alpha\beta}^{\text{дип}} = -i\mu\omega_{\alpha\beta}(\vec{e}_k\vec{r}_{\alpha\beta}).$$

У тому випадку, коли конкретному переходу відповідає умова  $\vec{r}_{\alpha\beta} = 0$ , необхідно додатково проаналізувати загальний матричний елемент

$$\begin{aligned} B_{\alpha\beta} &= -i\mu\omega_{\alpha\beta}(\vec{e}_k\vec{r}_{\alpha\beta}) \mp i \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})(\vec{k}\vec{r})(\vec{e}_k\vec{p})\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu = \\ &= \mp i\vec{e}_k \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})(\vec{k}\vec{r})\vec{p}\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu, \end{aligned} \quad (23.15)$$

отриманий зі співвідношення (22.10) при використанні уточнення наближеного розкладу  $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}} \approx 1 \pm i\vec{k}\vec{r}$ . Розглянемо цей вираз, вибираючи конкретну орієнтацію векторів  $\vec{k} \parallel \vec{e}_x$  та  $\vec{e}_k \parallel \vec{e}_y$  (рис. 23.1). Їй відповідає матричний елемент

$$B_{\alpha\beta}^{(z)} = \mp i \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})kx\hat{p}_y\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu, \quad (23.16)$$

який після формальної заміни  $x\hat{p}_y = \frac{1}{2}(x\hat{p}_y + y\hat{p}_x) + \frac{1}{2}(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)$  можна переписати у вигляді

$$B_{\alpha\beta}^{(z)} = \mp i \frac{k}{2} \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})(x\hat{p}_y + y\hat{p}_x)\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu \mp i \frac{k}{2} \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu. \quad (23.17)$$

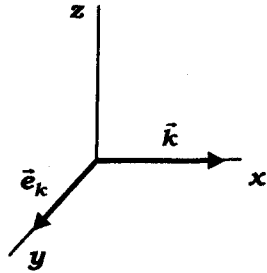


Рис. 23.1. Орієнтація хвильового вектора та вектора поляризації при розрахунку ймовірності мультипольного переходу

Приведемо операторні вирази в обох доданках (23.17) до вигляду

$$x\hat{p}_y + y\hat{p}_x = x\mu \frac{dy}{dt} + y\mu \frac{dx}{dt} = \mu \frac{d(xy)}{dt} = \mu \frac{1}{i\hbar} [xy, \hat{H}], \quad (23.18)$$

$$x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \hat{L}_z = -\frac{2\mu c}{e} \hat{M}_z,$$

зручного для подальшого аналізу. Використовуючи першу заміну в (23.18), перетворимо інтеграл у першому доданку на (23.17):

$$\begin{aligned} & \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})(x\hat{p}_y + y\hat{p}_x)\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu = \\ &= \frac{\mu}{i\hbar} \left\{ \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})xy\hat{H}\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu - \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})\hat{H}xy\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu \right\} = \\ &= \frac{\mu}{i\hbar} \left\{ E_{\beta} \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})xy\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu - \int xy\Psi_{\beta}(\vec{r})\hat{H}^*\Psi_{\alpha}^*(\vec{r})d\nu \right\} = \\ &= \frac{\mu}{i\hbar} \left\{ E_{\beta} \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})xy\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu - E_{\alpha} \int xy\Psi_{\beta}(\vec{r})\Psi_{\alpha}^*(\vec{r})d\nu \right\} = i\mu\omega_{\alpha\beta}(xy)_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (23.19)$$

беручи до уваги співвідношення

$$\hat{H}\Psi_{\beta}(\vec{r}) = E_{\beta}\Psi_{\beta}(\vec{r}), \quad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (23.20)$$

та умову самоспряженості для оператора Гамільтона  $\hat{H}$ :

$$\int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r})\hat{H}xy\Psi_{\beta}(\vec{r})d\nu = \int xy\Psi_{\beta}(\vec{r})\hat{H}^*\Psi_{\alpha}^*(\vec{r})d\nu. \quad (23.21)$$

Підставляючи ці результати в (23.17), отримуємо структурований вираз для матричного елементу

$$\begin{aligned} B_{nlm,n'l'm'}^{(z)} &= \pm \frac{1}{2} k\mu\omega_{nm}(xy)_{nlm,n'l'm'} \mp i \frac{k}{2} (\hat{L}_z)_{nlm,n'l'm'} = \\ &= \pm \frac{k\mu\omega_{nm}}{e} (Q_{xy})_{nlm,n'l'm'} \pm i \frac{k\mu c}{e} (\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'} = \\ &= \pm \frac{k\mu\omega_{nm}}{e} \left( (Q_{xy})_{nlm,n'l'm'} + i \frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'} \right). \end{aligned} \quad (23.22)$$

У (23.22) величина  $\hat{Q}_{xy} = \frac{e}{2}xy$  є одним із елементів матриці квадрупольного електричного моменту атома

$$\hat{Q} = \frac{e}{2} \begin{pmatrix} xx & xy & xz \\ yx & yy & yz \\ zx & zy & zz \end{pmatrix}, \quad (23.23)$$

а  $\hat{M}_z$  – проекцією орбітального магнітного моменту атома на вісь  $oz$ . Остаточний вираз для ймовірності радіаційного переходу, забороненого в дипольному наближенні, має вигляд

$$P_{nlm,n'l'm'}^{(z)} = J_0 \frac{4e^2\pi^2}{\hbar\mu^2\omega^2c} \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega) |B_{nlm,n'l'm'}|^2 =$$

$$= J_0 \frac{\pi^2\omega_{nm}^2\mu^2}{\hbar c^3} \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega) |(\hat{Q}_{xy})_{nlm,n'l'm'} + i\frac{c}{\omega_{nm}}(\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'}|^2. \quad (23.24)$$

При циклічній зміні орієнтації векторів (для випадків  $\vec{k} \parallel \vec{e}_y$ ,  $\vec{e}_k \parallel \vec{e}_z$  та  $\vec{k} \parallel \vec{e}_z$ ,  $\vec{e}_k \parallel \vec{e}_x$ ) вирази для матричного елемента та ймовірності переходу знаходимо з (23.22) і (23.24) простою циклічною заміною відповідних координат  $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x \rightarrow y \rightarrow \dots$ , вони матимуть такий вигляд:

$$B_{nlm,n'l'm'}^{(x)} = \mp \frac{1}{2} k\mu\omega_{nm} (yz)_{nlm,n'l'm'} \mp i\frac{k}{2} (\hat{L}_x)_{nlm,n'l'm'} =$$

$$= \pm \frac{k\mu\omega_{nm}}{e} \left( (Q_{yz})_{nlm,n'l'm'} + i\frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_x)_{nlm,n'l'm'} \right), \quad (23.25)$$

$$P_{nlm,n'l'm'}^{(x)} = \frac{J_0\pi^2\omega_{nm}^2\mu^2}{\hbar c^3} \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega) |(\hat{Q}_{yz})_{nlm,n'l'm'} +$$

$$+ i\frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_x)_{nlm,n'l'm'}|^2, \quad (23.26)$$

$$B_{nlm,n'l'm'}^{(y)} = \mp \frac{1}{2} k\mu\omega_{nm} (zx)_{nlm,n'l'm'} \mp i\frac{k}{2} (\hat{L}_y)_{nlm,n'l'm'} =$$

$$= \pm \frac{k\mu\omega_{nm}}{e} \left( (Q_{zx})_{nlm,n'l'm'} + i\frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_y)_{nlm,n'l'm'} \right), \quad (23.27)$$

$$P_{nlm,n'l'm'}^{(y)} = \frac{J_0\pi^2\omega_{nm}^2\mu^2}{\hbar c^3} \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega) |(\hat{Q}_{zx})_{nlm,n'l'm'} +$$

$$+ i\frac{c}{\omega_{nm}} (\hat{M}_y)_{nlm,n'l'm'}|^2. \quad (23.28)$$

Переходи, пов'язані з матричними елементами  $(\hat{Q}_{x_i x_j})_{nlm,n'l'm'}$  електричного квадрупольного моменту атома, називають *квадрупольними переходами* (скорочене позначення  $E2$ ). Переходи, пов'язані з матричними елементами  $(\hat{M}_x)_{nlm,n'l'm'}$  магнітного дипольного моменту атома, називають *магнітними дипольними переходами* (скорочене позначення  $M1$ ). Визначимо правила відбору для цих переходів.

Правила відбору для електричних квадрупольних переходів знаходимо, використовуючи відомі правила множення матриць

$$(\hat{A}\hat{B})_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} \hat{A}_{\alpha\gamma} \hat{B}_{\gamma\beta} \quad (23.29)$$

і враховуючи умови (23.14), за яких матричні елементи різних компонент оператора координати відмінні від нуля. Для орбітального квантового числа знаходимо умови

$$(xy)_{l'l'} = \sum_{l''} x_{l''} y_{l'l''}, (yz)_{l'l'} = \sum_{l''} y_{l''} z_{l'l''}, (zx)_{l'l'} = \sum_{l''} z_{l''} x_{l'l''}, \quad (23.30)$$

за допомогою яких матричний елемент від добутку координат можна звести до комбінації матричних елементів від кожної з координат.

Враховуючи, що матричні елементи  $x_{l'l''}, y_{l'l''}, z_{l'l''}$  та  $y_{l'l''}, z_{l'l''}, x_{l'l''}$  відмінні від нуля за умов  $l = l'' \pm 1$ ,  $l' = l'' \pm 1$ , знаходимо зв'язок між початковим і кінцевим орбітальними квантовими числами при електричних квадрупольних переходах

$$l' = l, l \pm 2. \quad (23.31)$$

Аналогічно зі співвідношень

$$(xy)_{mm'} = \sum_{m''} x_{mm''} y_{m''m'}, (yz)_{mm'} = \sum_{m''} y_{mm''} z_{m''m'}, (zx)_{mm'} = \sum_{m''} z_{mm''} x_{m''m'} \quad (23.32)$$

та умов (23.14) знаходимо правила відбору для магнітного квантового числа для електричних квадрупольних переходів  $E2$  різної орієнтації:

$$(xy)_{mm'} : m' = m, m \pm 2,$$

$$(yz)_{mm'} : m' = m \pm 1,$$

$$(zx)_{mm'} : m' = m \pm 1,$$

$$(\hat{Q})_{mm'} : m' = m, m \pm 1, m \pm 2. \quad (23.33)$$

Для магнітних дипольних переходів правила відбору можна знайти безпосередньо з означення

$$(\hat{M}_{x,y,z})_{nlm,n'l'm'} = -\frac{2\mu c}{e} (\hat{L}_{x,y,z})_{nlm,n'l'm'} =$$

$$= -\frac{2\mu c}{e} \int \Psi_{nlm}^*(r, \theta, \varphi) \hat{L}_{x,y,z} \Psi_{n'l'm'}(r, \theta, \varphi) d\nu. \quad (23.34)$$

Оператори  $\hat{L}_{x,y}$  не є інтегралами руху, і тому для них справедливий закон перетворення

$$\hat{L}_{x,y} \Psi_{n'l'm'}(r, \theta, \varphi) \sim \Psi_{n'l'(m' \pm 1)}(r, \theta, \varphi). \quad (23.35)$$

Підставляючи (23.35) у (23.34), знаходимо правила відбору для двох компонент магнітного дипольного моменту

$$(\hat{M}_{x,y})_{nlm,n'l'm'} = -\frac{2\mu\sigma\alpha_{l'm'}}{e} \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{m,m'\pm 1}, \quad n' = n, l' = l, m' = m \pm 1. \quad (23.36)$$

Для оператора  $\hat{L}_z$ , який є інтегралом руху, діє умова

$$\hat{L}_z \Psi_{n'l'm'}(r, \theta, \varphi) = m' \hbar \Psi_{n'l'm'}(r, \theta, \varphi), \quad (23.37)$$

яка приводить до правил відбору

$$(\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'} = -\frac{2\mu\sigma m \hbar}{e} \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad n' = n, l' = l, m' = m. \quad (23.38)$$

Таким чином, за рахунок магнітних дипольних переходів  $M1$  відбуваються переходи

$$n' = n, l' = l, m' = m \pm 1, \quad (23.39)$$

які заборонені в електричних дипольних переходах типу  $E1$ .

Порівняння структури виразів (23.24) і (23.25) показує, що ймовірність вимушених переходів типу  $M1$ , пов'язаних з матричними елементами  $(\hat{M}_z)_{nlm,n'l'm'}$ , у

$$(|r_{nlm,n'l'm'}| \omega_{nm} / c)^{-2} = (k |r_{nlm,n'l'm'}|)^{-2} \gg 1 \quad (23.40)$$

разів менша, ніж аналогічна ймовірність у випадку переходів типу  $E2$ , пов'язаних з  $(\hat{Q}_{zx})_{nlm,n'l'm'}$ . У свою чергу, переходи типу  $E2$  перебувають у такому самому співвідношенні до переходів типу  $E1$ .

Процедуру впливу розкладу фазової експоненти  $e^{\pm i\vec{k}\vec{r}} \approx 1 \pm i\vec{k}\vec{r} - (\vec{k}\vec{r})^2 / 2 + \dots$  на ймовірність вимушеного переходу (22.10) можна продовжувати. Кожний наступний член розкладу приводить до зміни правил відбору й відповідає певній мультипольності електричних (типу  $EL$ ) і магнітних (типу  $ML$ ) переходів. При цьому відносна ймовірність радіаційних переходів типу  $EL$ , пов'язаних з урахуванням  $L$ -го члена цього розкладу, у  $\approx (k |r_{nlm,n'l'm'}|)^{-2(L-1)}$  разів менша, ніж ймовірність дозволеного переходу типу  $E1$ . Для магнітних переходів це відповідає зменшенню в  $\approx (k |r_{nlm,n'l'm'}|)^{-2L}$  разів.

Необхідно зауважити, що переходи з мультипольністю, вищою за  $E2$  та  $M1$ , зустрічаються й мають істотне значення тільки в ядерній фізиці.

### Контрольні запитання

1. Пояснити, чому переходи вищої мультипольності неможливо спостерігати в атомах і чому вони існують при ядерних переходах?
2. Які переходи у квантових системах пов'язані з електричною та магнітною компонентами електромагнітного поля?

**Література:** [1], § 90; [2], § 54–56.

## § 24. Фотоефект у атомних системах

Розглянемо процес фотоіонізації атома, при якому початковий стан атомного електрона відповідає його перебуванню на основному рівні атома із хвильовою функцією

$$\Psi_1 = \Psi_{100} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} e^{-Zr/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad (23.1)$$

та енергією  $E_1 = -Z^2 e^4 \mu / 2\hbar^2$ , а кінцевий стан

$$\Psi_m = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}\vec{r}} \quad (24.2)$$

відповідає вільному електрону, який покинув атом і рухається з імпульсом  $\vec{p}$  і кінетичною енергією  $E_m = p^2 / 2\mu$ . Оскільки в цьому випадку розмір системи, яка міститься в об'ємі квантування  $V$ , є необмежено великим, застосування дипольного або будь-якого іншого мультипольного наближення неможливе, тому необхідно користуватися загальною формулою (22.10) для ймовірності

$$P_{1m}(p) = \frac{4\pi^2 e^2 J_0}{\hbar \mu^2 \omega^2 c} \delta(E_1 - E_m + \hbar\omega) |B_{1m}|^2, \quad (24.3)$$

$$B_{1m} = \vec{e}_k \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} \int_V e^{-Zr/a} \{e^{i\vec{k}\vec{r}} (-i\hbar\nabla)\} e^{i\vec{p}\vec{r}} dv.$$

Перетворимо підінтегральний вираз на (24.3), використовуючи самоспряженість оператора  $e^{i\vec{k}\vec{r}} \hat{p}$  та інтегрування по частинах

$$B_{1m} = \bar{e}_k i \hbar \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} \int_V e^{i(\frac{\bar{p}}{\hbar} - \bar{k})\bar{r}} \nabla e^{-Zr/a} dv =$$

$$= \bar{e}_k i \hbar \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} \left\{ e^{i(\frac{\bar{p}}{\hbar} - \bar{k})\bar{r}} e^{-Zr/a} \Big|_{V \rightarrow \infty} + i \left( \frac{\bar{p}}{\hbar} - \bar{k} \right) \int_V e^{i(\frac{\bar{p}}{\hbar} - \bar{k})\bar{r}} e^{-Zr/a} dv \right\}. \quad (24.4)$$

На віддаленій межі квантової системи перший доданок у фігурних дужках дорівнює нулю. Введемо результуючий хвильовий вектор  $\bar{q} = \bar{k} - \bar{p}/\hbar$  та обчислимо інтеграл у формулі (24.4) у тимчасово введеній сферичній системі координат (рис. 24.1), де цей вектор збігається з віссю  $z$ :

$$B_{1m} = -(\bar{e}_k \bar{p}) \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3 V}} 2\pi \hbar \int_0^\infty e^{-Zr/a} r^2 dr \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta =$$

$$= -\sqrt{\frac{\pi a^3}{Z^3 V}} \frac{8(\bar{e}_k \bar{p})}{(1 + a^2 q^2 / Z^2)^2}. \quad (24.5)$$

Враховуючи цей результат, можна записати вираз для парціальної ймовірності фотоелекту (24.3) у вигляді формули

$$P_{1m}(p) = \frac{1024\pi^3 a^3 e^2 J_0}{\hbar \mu^2 \omega^2 c Z^3 V} \frac{|\bar{e}_k \bar{p}|^2}{(1 + a^2 q^2 / Z^2)^4} \delta(E_1 - \frac{p^2}{2\mu} + \hbar\omega). \quad (24.6)$$

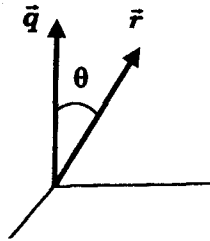


Рис. 24.1. Розрахунок матричного елемента енергії взаємодії електрона з електромагнітною хвилею

Величина  $P_{1m}$  визначає ймовірність процесу, при якому в результаті дії електромагнітної хвилі з атома вилітає електрон. Він має імпульс  $\bar{p}$ , величина якого відповідає закону збереження енергії  $\frac{p^2}{2\mu} = E_1 + \hbar\omega$ .

Ця умова визначає лише абсолютну величину імпульсу, їй відповідає безліч напрямків вильоту електрона. Задача є виродженою. Повну ймовірність можна визначити, враховуючи всі можливі кінцеві стани електрона після вильоту з атома.

Кількість можливих станів електронів  $\Delta N(V, \Delta\Omega, p)$  в об'ємі  $V$  в інтервалі імпульсів від  $p=0$  до  $p$  у межах малого тілесного кута  $\Delta\Omega$  визначається формулою

$$\Delta N(V, \Delta\Omega, p) = g \frac{\int d^3 p \int dV}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V\Delta\Omega}{4\pi^3 \hbar^3} \int_0^p p^2 dp, \quad (24.7)$$

аналогічно співвідношенням (14.15) і (14.16). Із (24.7) знаходимо вираз для густини імпульсного розподілу електронних станів у об'ємі квантування

$$\frac{d\Delta N(V, \Delta\Omega, p)}{dp} = \frac{V\Delta\Omega p^2}{4\pi^3 \hbar^3}. \quad (24.8)$$

Для подальшого розрахунку перетворимо  $\delta$ -функцію із формули (24.6):

$$\delta(E_1 - \frac{p^2}{2\mu} + \hbar\omega) = 2\mu \delta(p^2 - 2\mu(E_1 + \hbar\omega)). \quad (24.9)$$

Повну ймовірність фотоелекту можна знайти, якщо провести інтегрування (24.6) з урахуванням густини розподілу електронних станів (24.8):

$$\Delta P_{1m}(\Delta\Omega) = \int P_{1m}(p) \frac{d\Delta N(V, \Delta\Omega, p)}{dp} dp =$$

$$= 256 \int \frac{|\bar{e}_k \bar{p}|^2}{(1 + a^2 q^2 / Z^2)^4} \sqrt{p^2} \delta(p^2 - 2\mu(E_1 + \hbar\omega)) dp^2 = \quad (24.10)$$

$$= \frac{256 a^3 e^2 \Delta\Omega J_0 \sqrt{2(E_1 + \hbar\omega)}}{\hbar^4 \omega^2 c Z^3 \sqrt{\mu}} \frac{|\bar{e}_k \bar{p}|^2}{(1 + a^2 q^2 / Z^2)^4} \Big|_{p=\sqrt{2\mu(E_1 + \hbar\omega)}}$$

Взаємне розташування векторів  $\bar{p}$ ,  $\bar{k}$  і  $\bar{q}$  у лабораторній системі координат представлено на рис. 24.2.



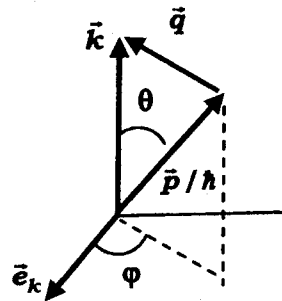


Рис. 24.2. Взаємна орієнтація хвильового вектора  $\vec{k}$  і вектора поляризації хвилі  $\vec{e}_k$  щодо імпульсу електрона  $\vec{p}$

Для випадку випромінювання із частотою  $\hbar\omega \gg |E_1|$ , яка значно перевищує потенціал іонізації, вираз (24.10) можна істотно спростити, використовуючи результати проміжних розрахунків

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{p^2}{2\mu\hbar c}, \quad |\vec{e}_k \vec{p}|^2 = 2\mu\hbar\omega \sin^2 \theta \cos^2 \varphi,$$

$$q^2 = k^2 - 2 \frac{pk}{\hbar} \cos \theta + \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \left( 1 - 2 \frac{\hbar k}{p} \cos \theta + \frac{\hbar^2 k^2}{p^2} \right) =$$

$$= \frac{2\mu\omega}{\hbar} \left( 1 - \frac{p}{\mu c} \cos \theta + \frac{p^2}{2\mu^2 c^2} \right) = \frac{2\mu\omega}{\hbar} \left( 1 - \frac{v}{c} \cos \theta + \frac{v^2}{2c^2} \right),$$

$$\frac{a^2 q^2}{Z^2} = \frac{\hbar\omega}{(Z^2 e^4 \mu / 2\hbar^2)} \left( 1 - \frac{v}{c} \cos \theta + \frac{v^2}{2c^2} \right) \gg 1. \quad (24.11)$$

Підставимо ці співвідношення в (24.10) і врахуємо, що енергетична інтенсивність електромагнітної хвилі  $J_0$  унаслідок квантової природи будь-якого електромагнітного поля залежить від частоти випромінювання. Ввівши потокову інтенсивність  $I_0$  у вигляді (22.5)  $J_0 = \hbar\omega I_0$ , знаходимо остаточний вираз для повної та диференціальної ймовірностей фотоефекту

$$\Delta P_{1m}(\Delta\Omega) = D \Delta\Omega I_0 \frac{Z^5 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{\omega^{7/2} \left( 1 - \frac{v}{c} \cos \theta + \frac{v^2}{2c^2} \right)^4}, \quad D = \left( \frac{4\sqrt{2} e^{12} \mu^{3/2}}{\hbar^{7/2} c} \right),$$

$$\frac{\Delta P_{1m}}{\Delta\Omega} = D I_0 \frac{Z^5 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi}{\omega^{7/2} \left( 1 - \frac{v}{c} \cos \theta + \frac{v^2}{2c^2} \right)^4}. \quad (24.12)$$

Бачимо, що ймовірність фотоефекту дуже сильно залежить від заряду ядра ( $\sim Z^5$ ) і від частоти випромінювання ( $\sim \omega^{-7/2}$ ). При цьому частота випромінювання впливає на кутову залежність вильоту фотоелектронів. За відносно низької частоти  $\omega$ , для якої швидкість фотоелектронів мала

$$v = \sqrt{2\hbar\omega/\mu} \ll c, \quad (24.13)$$

впливом залежного від кута виразу в знаменнику (24.13) можна знехтувати. У цьому випадку діаграма вильоту фотоелектронів визначається виразом  $\sin^2 \theta \cos^2 \varphi$  і характеризується максимумом у напрямку  $\theta = \pm\pi/2, \varphi = 0$ , що збігається з вектором поляризації  $\vec{e}_k$  і перпендикулярний хвильовому вектору  $\vec{k}$ .

При зростанні частоти і відповідно зростанні відношення  $v/c$  необхідно враховувати вплив виразу  $1 - (v/c)\cos\theta$  у співвідношенні (24.13), що приводить до того, що максимум вильоту фотоелектронів зміщується в напрямку хвильового вектора. При необмеженому зростанні частоти падаючої хвилі фотоелектрони будуть вилітати в напрямку хвильового вектора. Це перетворення діаграми кутового розподілу напрямків вильоту фотоелектронів представлено на рис. 24.3.

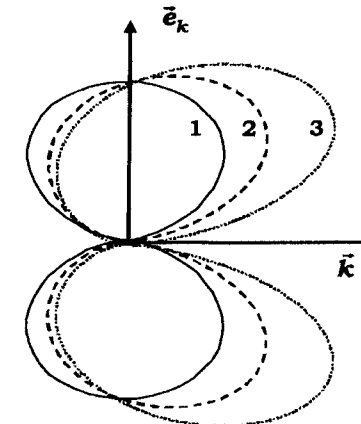


Рис. 24.3. Кутова діаграма розподілу ймовірності вильоту фотоелектронів залежно від відношення  $v/c$ :  
1)  $v_1/c \ll 1$ , 2) і 3) символічне зображення зміни діаграми при виконанні співвідношення  $v_1 < v_2 < v_3$

Зауважимо що детально ефект релятивістської деформації напрямку вильоту фотоелектронів можна дослідити тільки на основі релятивістських рівнянь квантової механіки.

**Контрольні запитання**

1. Чи залежить кутовий розподіл вильоту фотоелектронів від частоти та поляризації електромагнітного поля?
2. Чи змінюється залежність імовірності фотоефекту від заряду ядра залежно від частоти електромагнітного поля?
3. Пояснити, чому ймовірність фотоефекту залежить від заряду ядра.

**Література:** [1], § 95; [2], § 58.

## Розділ VIII

### ТЕОРІЯ СПОНТАННОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ КВАНТОВИХ СИСТЕМ

#### § 25. Теорія спонтанного випромінювання атомів у обмежених системах

##### 25.1. Електромагнітне поле як фізичний об'єкт з квантовими характеристиками

Спонтанний розпад збуджених систем і пов'язане з ним спонтанне електромагнітне випромінювання є одними з найбільш цікавих і важливих процесів у мікрофізиці, до складу якої входять молекулярна, атомна та ядерна фізика. Хоча спонтанне випромінювання не є ефектом, який притаманний винятково квантовим системам (звичайне випромінювання будь-якого прискореного заряду, яке існує в класичній електродинаміці, теж є своєрідним спонтанним випромінюванням), але послідовно і максимально повно його можна проаналізувати та пояснити тільки за допомогою квантових представлень.

Для коректного аналізу поставленої задачі необхідно розглядати квантові властивості не тільки досліджуваного об'єкту (напр. атома), але й оточуючого його електромагнітного поля, тобто обґрунтувати та пояснити-

ти деякі положення квантової електродинаміки. У квантовій електродинаміці довільне поле випромінювання у вільному від зарядів об'ємі  $V_0$  можна представити у вигляді розкладу за повним набором власних ортогональних мод. Найбільш простим є представлення вектор-потенціалу  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  довільної електромагнітної хвилі у випадку макроскопічної системи з лінійними розмірами  $L \gg \lambda$ , які значно перевищують довжину хвилі. В об'ємі прямокутного паралелепіпеда зі сторонами  $L_x, L_y, L_z$  та об'ємом  $V_0$  вектор-потенціал поля має вигляд розкладу

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\beta} \vec{e}_{\beta} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega_{\beta} V_0}} \left\{ a_{\beta} e^{i(\vec{k}_{\beta} \vec{r} - \omega_{\beta} t + \varphi_{\beta})} + a_{\beta}^* e^{-i(\vec{k}_{\beta} \vec{r} - \omega_{\beta} t + \varphi_{\beta})} \right\} \quad (25.1)$$

за системою власних мод електромагнітного поля, які є плоскими хвилями.

Зміст запису нормуючих коефіцієнтів вектор-потенціалу  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  у вигляді  $\sqrt{2\pi c^2 \hbar / \omega_{\beta} V_0}$  полягає в тому, що саме при такому нормуванні енергія кожної моди електромагнітного поля в основному (найнижчому за енергією) стані дорівнює  $\hbar \omega_{\beta} / 2$ . Це відповідає співвідношенню невизначеностей для електромагнітного поля, його розглянемо далі.

У співвідношенні (25.1) величина  $\vec{e}_{\beta}$  є одиничним вектором поляризації плоскої хвилі з номером  $\beta$ . Проекції довжин хвиль  $\lambda_{\beta(x,y,z)}$  і відповідні компоненти  $k_{\beta(x,y,z)}$  хвильових векторів  $\vec{k}_{\beta}$  кожної з мод  $\beta$ , що поширюються в напрямку трьох взаємно ортогональних координат, відповідають граничним умовам періодичності

$$\lambda_{\beta(x,y,z)} = \frac{L_{\beta(x,y,z)}}{n_{\beta(x,y,z)}}, \quad k_{\beta(x,y,z)} = \frac{2\pi n_{\beta(x,y,z)}}{L_{\beta(x,y,z)}}, \quad n_{\beta(x,y,z)} = 1, 2, 3, \dots \quad (25.2)$$

За інших граничних умов (зокрема у резонаторі з металевими стінками) спектр величин  $\lambda_{\beta(x,y,z)}$  та  $k_{\beta(x,y,z)}$  може бути іншим.

Із формули (25.1) можна знайти напруженість електричного та магнітного полів

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \\ &= \sum_{\beta} i \vec{e}_{\beta} \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar \omega_{\beta}}{V_0}} \left\{ a_{\beta} e^{i(\vec{k}_{\beta} \vec{r} - \omega_{\beta} t + \varphi_{\beta})} - a_{\beta}^* e^{-i(\vec{k}_{\beta} \vec{r} - \omega_{\beta} t + \varphi_{\beta})} \right\}, \end{aligned} \quad (25.3)$$

$$\begin{aligned} \vec{H}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t) = \\ &= \sum_{\beta} i [\vec{e}_{\beta} \times \vec{k}_{\beta}] \sqrt{\frac{2\pi c^2 \hbar}{\omega_{\beta} V_0}} \left\{ a_{\beta} e^{i(\vec{k}_{\beta} \vec{r} - \omega_{\beta} t + \varphi_{\beta})} - a_{\beta}^* e^{-i(\vec{k}_{\beta} \vec{r} - \omega_{\beta} t + \varphi_{\beta})} \right\}, \end{aligned} \quad (25.4)$$

а також загальну енергію всього поля в об'ємі  $V_0$ :

$$W = \int_{V_0} \left\{ \frac{|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2 + |\vec{H}(\vec{r}, t)|^2}{8\pi} \right\} dV = \sum_{\beta} W_{\beta}. \quad (25.5)$$

Величина

$$W_{\beta} = \hbar \omega_{\beta} (a_{\beta} a_{\beta}^* + a_{\beta}^* a_{\beta}) / 2 \quad (25.6)$$

є енергією однієї моди поля.

Показано (див. (10.45)), що замість двох складових амплітуд  $a_{\beta}$  та  $a_{\beta}^*$  для кожної моди вектор-потенціалу  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  можна ввести оператори народження  $\hat{a}_{\beta}^+$  і знищення  $\hat{a}_{\beta}$  фотонів у цих модах, які діють на довільну хвильову функцію однієї моди  $\varphi_{n_{\beta}}(\vec{r})$  відповідно до правил

$$\hat{a}_{\beta}^+ \varphi_{n_{\beta}}(\vec{r}) = \sqrt{n_{\beta} + 1} \varphi_{n_{\beta}+1}(\vec{r}), \quad (25.7)$$

$$\hat{a}_{\beta} \varphi_{n_{\beta}}(\vec{r}) = \sqrt{n_{\beta}} \varphi_{n_{\beta}-1}(\vec{r}), \quad (25.8)$$

тобто збільшують або зменшують на одиницю кількість фотонів  $n_{\beta}$  у моді  $\beta$ . При використанні правил (25.7) і (25.8) із рівнянь (25.5) і (25.6) випливає вираз для операторів Гамільтона всього поля  $\hat{H}_F(\vec{r})$  і кожної моди  $\hat{H}_{F\beta}(r)$ :

$$\hat{H}_F(\vec{r}) = \sum_{\beta} \hat{H}_{F\beta}(\vec{r}), \quad (25.9)$$

$$\hat{H}_{F\beta}(\vec{r}) = \hbar \omega_{\beta} (a_{\beta} a_{\beta}^* + a_{\beta}^* a_{\beta}) / 2 = \hbar \omega_{\beta} (a_{\beta} a_{\beta}^* + 1/2). \quad (25.10)$$

Власні значення оператора  $\hat{H}_{F\beta}(\vec{r})$  визначають енергію моди  $E_{n_{\beta}}$ :

$$\hat{H}_{F\beta}(\vec{r}) \varphi_{n_{\beta}}(\vec{r}) = E_{n_{\beta}} \varphi_{n_{\beta}}(\vec{r}).$$

Якщо подіяти оператором Гамільтона (25.10) однієї моди  $\hat{H}_{F\beta}(\vec{r})$  на хвильову функцію цієї самої моди поля  $\varphi_{n_{\beta}}(\vec{r})$  і використати правило дії операторів  $\hat{a}_{\beta}^+$  і  $\hat{a}_{\beta}$  (25.7) та (25.8), то отримаємо вираз для енергії

моди  $E_{n_\beta} = \hbar\omega_\beta(n_\beta + 1/2)$ . Видно, що енергетичний спектр можливих значень енергії моди повністю аналогічний гармонічному осцилятору. Це означає, що кожна з мод квантованого поля є гармонічним осцилятором. У незбудженій моді (при  $n_\beta = 0$ ) її енергія  $E_{n_\beta=0} = \hbar\omega_\beta/2$  відповідає основному (вакуумному) стану й визначається співвідношенням невизначеностей.

Квантоване електромагнітне поле в основному (вакуумному) стані є реальним фізичним об'єктом, властивості якого можна безпосередньо виміряти. Локалізоване електромагнітне поле (у т. ч. поле у вакуумному стані) є носієм потенціальної енергії й чинить тиск на об'єкти, які визначають цю локалізацію. Цей ефект відкрив Х. Казимір у 1948 р., звідси походить і його назва – *сили Казимира*. Наприклад, сила, яка діє на поверхню кожної з двох металевих пластин великого перерізу  $S$ , розташованих у вакуумі на відстані  $L \ll \sqrt{S}$  паралельно одна одній, визначається виразом

$$F = -\frac{\hbar c \pi^2}{240 L^4}.$$

Від'ємний знак показує, що в даному випадку ця сила має характер взаємного притягування, а її походження визначається тим, що об'ємна густина енергії поля в основному стані в просторі між пластинами буде меншою, ніж за їх відсутності (або за межами цих пластин). Це явище пов'язане зі зменшенням частотної густини мод поля в обмежених системах. У структурах з обмеженою площею ця сила буде спадати, а у структурах з більш складною формою поверхні – навіть змінювати знак. Наприклад, дві випуклі півсфери, виготовлені з металу, будуть розштовхуватись, якщо випуклі частини орієнтовані в напрямку одна до другої й притягуватись, якщо вони орієнтовані в протилежних напрямках. Останній випадок відповідає тому, що тіло у формі сферичної поверхні буде стискатися силою Казимира.

Далі, маючи на увазі аналіз задачі спонтанного розпаду атома в системі незбуджених мод, будемо розглядати поле, з яким взаємодіє збуджений атом, як суперпозицію ансамблю мод, кожна з яких у початковий момент перебуває в основному (вакуумному) стані із хвильовою функцією  $\varphi_{n_\beta=0}(\vec{r})$  і має енергію  $E_{n_\beta=0} = \hbar\omega_\beta/2$ . Якщо початковим станом (до початку процесу спонтанного розпаду атома) усієї системи (атом + поле) є стан  $e$  із хвильовою функцією  $\Psi_e(\vec{r})$ , при якому атом є збудженим, а кожна з мод поля перебуває в основному стані  $\varphi_{n_\beta=0}(\vec{r})$ , а кінцевим (тобто після завершення спонтанного розпаду) – стан  $g$  із

загальною хвильовою функцією  $\Psi_g(\vec{r})$  (при цьому атом перебуває в основному стані, а мода  $\beta$  є збудженою, містить один фотон і описується хвильовою функцією  $\varphi_{n_\beta=1}(\vec{r})$ ), то матричний елемент енергії взаємодії атома  $V = -\vec{d}\vec{E}_\beta$  із цією модою в дипольному наближенні описується співвідношенням

$$\begin{aligned} V_{eg(\beta)} &= \frac{e}{2\mu\omega} \int \Psi_e^*(\vec{r}) (\vec{E}_\beta(\vec{r}, t) \vec{p}) \Psi_g(\vec{r}) d^3r = \\ &= - \int \Psi_e^*(\vec{r}) (\vec{E}_\beta(\vec{r}_a, t) \vec{d}) \Psi_g(\vec{r}) d^3r = -i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_\beta}{V_0}} (\vec{d}_{eg} \vec{e}_\beta) e^{-i(\vec{k}_\beta \vec{r}_a - \omega_\beta t + \varphi_\beta)}, \end{aligned} \quad (25.11)$$

у якому  $\vec{r}_a$  – координата центра атома;  $\vec{d}_{eg}$  – матричний елемент дипольного моменту атома, який відповідає конкретному переходу атома зі збудженого стану  $e$  в основний стан  $g$  з одночасним збудженням моди поля  $\beta$ .

Частотнопросторовий розподіл мод електромагнітного поля у квантованому стані для випадку дискретного та квазінеперервного станів розглянемо далі.

## 25.2. Динаміка процесу взаємодії квантованого електромагнітного поля з атомом

Розглянемо динаміку процесу взаємодії атома з квантованим електромагнітним полем, використовуючи метод Вайскопфа – Вігнера. Оператор Гамільтона всієї системи має вигляд

$$\hat{H}(\vec{r}) = \hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q}) + \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}), \quad (25.12)$$

де  $\hat{H}_A$  – оператор Гамільтона атома,  $\hat{H}_F$  – оператор Гамільтона електромагнітного поля, а  $\hat{V} = \sum_\beta \hat{V}_\beta$  – оператор взаємодії атома з квантова-

ним електромагнітним полем, яке оточує атом. Індивідуальні стани атома та поля будемо характеризувати відповідно латинськими та грецькими літерами (індексами)  $a$  та  $\beta$ . Координати, які характеризують процеси, що стосуються атома та поля, будемо позначати, як  $\vec{r}_A$  та  $\vec{q}$ .

Процес спонтанного розпаду характеризує явище переходу енергії від атома, який перебував у збудженому стані, до системи мод поля, яка в початковий момент часу була незбудженою. Система, що відповідає процесу спонтанного розпаду, може перебувати у двох принципово різних (взаємно альтернативних) базових станах, які є власними функціями незбуреного (тобто без урахування взаємодії) оператора Гамільтона  $\hat{H}_0(\vec{r}) = \hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q})$  і взаємно ортогональними:

1) стан системи, коли атом збуджений і має енергію  $E_\alpha = \hbar\omega_\alpha$ , а кожна з мод поля перебуває у вакуумному стані. У такому стані загальна координатна хвильова функція всієї системи (за умови, що атом з полем не взаємодіє) є добутком хвильової функції атома  $\Psi_\alpha(\vec{r}_A)$  і хвильових функцій усіх мод поля  $\varphi_0(\vec{q})$ , і має вигляд

$$\Psi_{\alpha 0}(\vec{r}) = \Psi_\alpha(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}); \quad \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) = \prod_{\beta} \varphi_{\{0\beta\}}(\vec{q}).$$

Нижній індекс у виразі для хвильової функції атома  $\Psi_\alpha(\vec{r}_A)$  означає, що атом перебуває у збудженому стані з енергією  $E_\alpha = \hbar\omega_\alpha$ . Відповідно нижній індекс у виразі для загальної хвильової функції поля  $\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q})$  означає, що всі взаємно незалежні моди поля  $\varphi_{\{0\beta\}}(\vec{q})$  перебувають у найнижчому (вакуумному) стані;

2) сукупність можливих однотипних станів системи, коли після завершення спонтанного переходу атом перебуває в основному стані з енергією  $E_g$ , одна з мод поля збуджена і має енергію  $E_{n_\beta=1}$ , а всі інші ( $\alpha \neq \beta$ ) перебувають на основних рівнях  $E_{n_\alpha=0}$ , тобто у вакуумних станах кожної з мод поля. У кожному з таких станів координатна хвильова функція всієї системи має вигляд

$$\Psi_{0\beta}(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}); \quad \varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) = \prod_{\alpha \neq \beta} \varphi_{\{0\alpha\}}(\vec{q}).$$

Нижній індекс у виразі для хвильової функції атома  $\Psi_0(\vec{r}_A)$  означає, що атом перебуває в основному стані. Відповідно нижній індекс у виразі для загальної хвильової функції поля  $\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q})$  означає, що мода поля з номером  $\beta$  перебуває у збудженому стані, а інші ( $\alpha \neq \beta$ ) є незбудженими. Бачимо, що інших можливих станів у випадку тільки одного збудження, "блукаючого" по системі, не існує.

За нульове значення відліку енергії системи прийемо те значення, яке відповідає перебуванню атома та всіх мод поля в основному стані. Для спрощення подальших обчислень будемо використовувати таку шкалу відліку енергії, за якої повна енергія основного стану всієї

системи дорівнює нулю:  $E_g + \sum_{\beta} E_{n_\beta=0} = 0$ . Відповідно до принципу суперпозиції загальна хвильова функція  $\Psi(\vec{r}, t)$  усієї системи (вона містить атом + квантоване поле) має вигляд

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= A(t)\Psi_{\alpha 0}(\vec{r})e^{-iE_\alpha t/\hbar} + \sum_{\beta} F_{\beta}(t)\Psi_{0\beta}(\vec{r})e^{-iE_{\beta} t/\hbar} = \\ &= A(t)\Psi_\alpha(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q})e^{-iE_\alpha t/\hbar} + \sum_{\beta} F_{\beta}(t)\Psi_0(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q})e^{-iE_{\beta} t/\hbar}. \end{aligned} \quad (25.13)$$

У цьому виразі залежні від часу коефіцієнти  $A(t)$  та  $F_{\beta}(t)$  є амплітудами ймовірності перебування атома та кожної з мод поля в момент часу  $t$  у збудженому стані. Зміна із часом цих коефіцієнтів описує процес спонтанного розпаду атома (а також процеси збудження кожної з мод поля). Еволюція всієї системи та динаміка зміни цих коефіцієнтів описується нестационарним рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \{\hat{H}_A(\vec{r}_A) + \hat{H}_F(\vec{q}) + \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q})\}\Psi(\vec{r}, t). \quad (25.14)$$

Його можна перетворити, якщо врахувати явний вигляд результатів дії відповідних складових частин  $\hat{H}_A(\vec{r}_A)$  і  $\hat{H}_F(\vec{q})$  загального оператора Гамільтона  $\hat{H}(\vec{r})$ , на хвильові функції атома та мод поля, які є власними функціями цих складових частин:

$$\begin{aligned} \hat{H}_A(\vec{r}_A)\Psi_\alpha(\vec{r}_A) &= E_\alpha \Psi_\alpha(\vec{r}_A); \\ \hat{H}_A(\vec{r}_A)\Psi_0(\vec{r}_A) &= E_0 \Psi_0(\vec{r}_A) = 0; \\ \hat{H}_F(\vec{q})\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) &= E_0 \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) = 0; \\ \hat{H}_F(\vec{q})\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) &= E_{\beta} \varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}). \end{aligned}$$

Після підстановки загальної хвильової функції (25.13) у рівняння Шредінгера та виконання перелічених дій, отримаємо операторно-диференціальне рівняння

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \frac{\partial A(t)}{\partial t} \Psi_\alpha(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q})e^{-i\omega_\alpha t} + \sum_{\beta} \frac{\partial F_{\beta}(t)}{\partial t} \Psi_0(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q})e^{-i\omega_{\beta} t} \right\} = \\ = \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \left\{ A(t)\Psi_\alpha(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q})e^{-i\omega_\alpha t} + \sum_{\beta} F_{\beta}(t)\Psi_0(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q})e^{-i\omega_{\beta} t} \right\}, \end{aligned}$$

що описує процеси одночасної еволюції коефіцієнтів  $A(t)$  та  $F_{\beta}(t)$  і може бути перетворене на систему більш простих зв'язаних алгебра-

їчних рівнянь. Для цього спочатку домножимо його на власну функцію  $\Psi_a^*(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}^*(\vec{q})$ , яка відповідає збудженому стану атома, а потім проінтегруємо по всій області зміни аргументів. Далі домножимо це саме операторно-диференційне рівняння на одну із власних функцій  $\Psi_0^*(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}^*(\vec{q})$ , які відповідають збудженому стану однієї з мод поля (моди номер  $\beta$ ) і проінтегруємо по області зміни аргументів. Використовуючи ортогональність власних функцій і враховуючи, що  $V_{a0,a0} = V_{a0,a\beta} = V_{0\beta,0\beta} = V_{0\beta,0\gamma} = 0$ , отримуємо систему рівнянь:

$$i\hbar e^{-i\omega_a t} \frac{\partial A(t)}{\partial t} = \sum_{\beta} F_{\beta}(t) V_{a\beta} e^{-i\omega_{\beta} t}, \quad (25.14, a)$$

$$i\hbar e^{-i\omega_{\beta} t} \frac{\partial F_{\beta}(t)}{\partial t} = A(t) V_{a\beta}^* e^{-i\omega_a t}. \quad (25.14, б)$$

Матричні елементи  $V_{a\beta}$  енергії взаємодії атома з квантованим полем мають вигляд

$$V_{a\beta} \equiv V_{a0,0\beta} = \iint \Psi_a^*(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,0,\dots,0\}}^*(\vec{q}) \hat{V}(\vec{r}_A, \vec{q}) \Psi_0(\vec{r}_A)\varphi_{\{0,\beta,\dots,0\}}(\vec{q}) d^3 r_A d^3 q. \quad (25.15)$$

Рівняння (25.14, а та б) описують динаміку нестационарної зміни амплітуд збудження атома  $A(t)$  і всіх мод поля  $F_{\beta}(t)$ . Цю систему рівнянь будемо розв'язувати методом інтегральних перетворень Лапласа, які характеризуються правилами прямого

$$K_p = \int_0^{\infty} K(t) e^{-pt} dt \quad (25.16, a)$$

та оберненого

$$K(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} K_p e^{pt} dp \quad (25.16, б)$$

перетворень довільної функції  $K(t)$ .

Перейдемо від системи диференціальних рівнянь (25.14) для амплітуд імовірностей  $A(t)$  та  $F_{\beta}(t)$  до системи алгебраїчних рівнянь для зображень цих амплітуд. Спочатку домножимо кожне з рівнянь системи (25.14) на величину  $e^{-pt}$ , а потім проінтегруємо перетворені таким чином рівняння за змінною  $p$  у межах від 0 до  $\infty$ .

Якщо ввести функції зображення

$$A_p = \int_0^{\infty} A(t) e^{-i\omega_a t} e^{-pt} dt, \quad (25.17, a)$$

$$F_{\beta p} = \int_0^{\infty} F_{\beta}(t) e^{-i\omega_{\beta} t} e^{-pt} dt \quad (25.17, б)$$

від комбінації початкових функцій  $A(t)e^{-i\omega_a t}$  та  $F_{\beta}(t)e^{-i\omega_{\beta} t}$ , які входять до правої частини рівнянь (25.14, а та б), то після інтегрування по частинах система цих рівнянь набуде такого вигляду:

$$(i\omega_a + p)A_p = A(0) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\beta} F_{\beta p} V_{a\beta}, \quad (25.18, a)$$

$$(i\omega_{\beta} + p)F_{\beta p} = F_{\beta}(0) + \frac{1}{i\hbar} A_p V_{a\beta}^*. \quad (25.18, б)$$

У цій системі алгебраїчних рівнянь величини  $A(0)$  і  $F_{\beta}(0)$  відповідають початковим станам атома та довільної моди поля. Маючи на увазі розгляд питання про спонтанний розпад збудженого атома в системі мод електромагнітного поля, які перебувають у основному (найнижчому щодо енергії) стані й характеризується відсутністю фотонів, покладемо  $F_{\beta}(0) = 0$  (через виконання умови нормування повної ймовірності маємо  $|A(0)| = 1$ ).

Якщо підставити в (25.18, а) отримане з (25.18, б) співвідношення

$$F_{\beta p} = \frac{A_p V_{a\beta}^*}{i\hbar(i\omega_{\beta} + p)},$$

то отримаємо розв'язок

$$A_p = \frac{A(0)}{i\omega_a + p + \sum_{\beta} \frac{|V_{a\beta}|^2}{\hbar^2(i\omega_{\beta} + p)}}. \quad (25.19)$$

За допомогою оберненого перетворення Лапласа (25.16, а) знайдемо розв'язок для  $A(t)$ :

$$A(t) = \frac{1}{2\pi i} e^{i\omega_a t} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} A_p e^{pt} dp = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{\delta-i\infty}^{\delta+i\infty} \frac{e^{(i\omega_a + p)t} dp}{i\omega_a + p + \sum_{\beta} \frac{|V_{a\beta}|^2 / \hbar^2}{(i\omega_{\beta} + p)}}. \quad (25.20)$$

Після заміни  $p = i(\omega - \omega_a)$  цей вираз набуває вигляду

$$A(t) = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} \frac{e^{i\omega t} d\omega}{\omega - \sum_{\beta} \frac{|V_{a\beta}|^2 / \hbar^2}{(\omega_{\beta} - \omega_a + \omega)}}, \quad (25.21)$$

що є загальним розв'язком задачі про визначення залежних від часу характеристик спонтанного розпаду для довільного виду розподілу мод квантованого електромагнітного поля.

Конкретні випадки обчислення  $A(t)$  на основі (25.21) вимагають деталізації явного спектра мод поля, з якими взаємодіє атом. Різні варіанти взаємодії будуть розглянуті далі. Зараз можна лише зауважити, що підінтегральний вираз результату (25.21) (з урахуванням того, що  $\delta \rightarrow +0$ ) відповідає фур'є-спектру  $A(\omega)$  амплітуди  $A(t)$ :

$$|A(\omega)|^2 = \left| \omega - \sum_{\beta} \frac{|V_{a\beta}|^2 / \hbar^2}{(\omega_{\beta} - \omega_a + \omega)} \right|^{-2}. \quad (25.22)$$

Для визначення конкретного закону спонтанного розпаду збудженого атома як функції часу необхідно розглянути конкретну спектрально-кутову структуру мод електромагнітного поля, яке взаємодіє з атомом. Нижче проаналізуємо два граничні випадки: взаємодію атома лише з однією (резонансною до частоти атомного переходу  $\omega_a$ ) модою або двома (максимально близькими до резонансної) модами поля та взаємодію атома з великим квазінеперервним ансамблем мод квантованого електромагнітного поля.

### 25.3. Взаємодія збудженого атома з кількома резонансними модами електромагнітного поля

**25.3.1. Взаємодія атома з однією резонансною модою поля.** Із загального розв'язку задачі (25.21) випливає, що амплітуда та ймовірність спонтанного розпаду істотно залежать від величини суми

$$\sum_{\beta} \frac{|V_{a\beta}|^2}{\hbar^2 (\omega_{\beta} - \omega_a + \omega)},$$

яка стоїть у знаменнику (25.21), і враховує зв'язок кожної моди поля з атомом.

Розглянемо випадок, коли абсолютна величина міжмодового інтервалу  $\delta\omega = \omega_{\beta} - \omega_a$  у конкретній електродинамічній системі є настільки великою, що істотний внесок у цю суму дає тільки один (резонансний) член. Усі інші (нерезонансні) члени суми малі, для них

$$\frac{|V_{a\beta}|^2}{|\omega_{\beta \pm \Delta\beta} - \omega_a + \omega|} \ll \frac{|V_{a\beta}|^2}{|\omega_{\beta} - \omega_a + \omega|}. \quad (25.23)$$

Необхідно зауважити, що таке обмеження кількості мод, які впливають на процес взаємодії атома з полем тільки однією модою, базується не лише на тому факті, що знаменники відповідних нерезонансних членів суми (25.23) зменшуються зі збільшенням міжмодової відстані. Очевидно, що таке спадання (за законом  $1/|\omega_{\beta \pm \Delta\beta} - \omega_a + \omega|$ ) само по собі не забезпечує збіжності членів суми й за відсутності інших механізмів збіжності приводило б до логарифмічної розбіжності. Збіжність членів цієї суми пов'язана насамперед з явищем швидкого зменшення відповідних матричних елементів  $|V_{a\beta}|$  для нерезонансних мод зі збільшенням відстройки від оптимальної моди з  $\Delta\beta = 0$ . У символічному вигляді таке обмеження кількості істотних для процесу взаємодії з атомом  $A$  мод  $\beta$  поля  $F$  зображено на рис. 25.1, а.

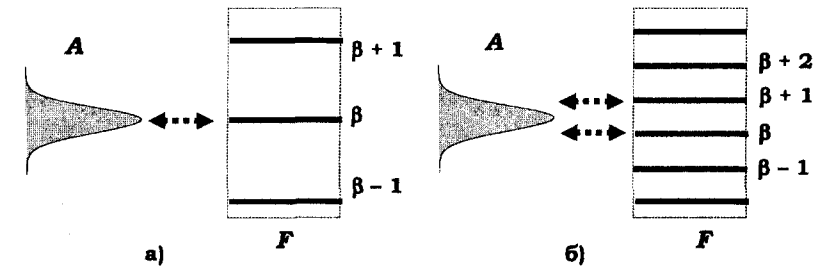


Рис. 25.1. Резонансна взаємодія атома  $A$  з однією (а) або двома (б) дискретно розподіленими модами електромагнітного поля  $F$ .

Функція розподілу зліва на кожному з випадків відповідає спектру резонансної взаємодії атома

За виконання умови (25.23) із рівняння (25.21) маємо

$$A(t) = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} \frac{e^{i\omega t} d\omega}{\omega - \frac{\Omega_0^2}{(\delta\omega + \omega)}}, \quad (25.24)$$

$$\delta\omega = \omega_{\beta} - \omega_a, \quad \Omega_0 = |V_{a\beta}| / \hbar.$$

Цей вираз можна перетворити на еквівалентний і більш зручний для обчислення, а саме:

$$A(t) = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{-\infty-i\delta}^{\infty-i\delta} \frac{(\delta\omega + \omega)e^{i\omega t} d\omega}{(\omega - \omega_1)(\omega - \omega_2)}, \quad (25.25)$$

де дві частоти

$$\omega_{1,2} = -\frac{\delta\omega}{2} \pm \Omega, \quad \Omega = \sqrt{\left(\frac{\delta\omega}{2}\right)^2 + \Omega_0^2} \quad (25.26)$$

є полюсами підінтегрального виразу (25.25), що лежать на дійсній осі площини комплексних частот  $\omega$ .

Для обчислення інтегралу необхідно замкнути шлях інтегрування дугою нескінченно великого радіуса, що лежить у верхній півплощині. Оскільки шлях інтегрування в (25.25) проходить нижче дійсної осі, то обидва полюси лежать усередині контуру інтегрування (рис. 25.2).

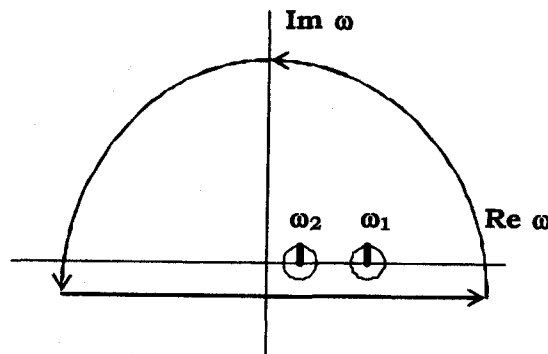


Рис. 25.2. Контур комплексного інтегрування при розрахунку ймовірності спонтанного розпаду атома

Обчислюючи залишки в полюсах підінтегрального виразу  $\omega_{1,2}$ , знаходимо остаточний вираз для амплітуди  $A(t)$  і повної ймовірності  $W(t) = |A(t)|^2$ , що атом у момент часу  $t$  перебуває у збудженому стані

$$A(t) = A(0) \left\{ \cos \Omega t + i \frac{\delta\omega}{2\Omega} \sin \Omega t \right\} e^{-i\frac{\delta\omega}{2}t}, \quad (25.27)$$

$$W_e(t) = 1 - \frac{\Omega_0^2}{\Omega} \sin^2 \Omega t. \quad (25.28)$$

Використовуючи (25.27), можна представити хвильову функцію повної системи (атом + поле) у збудженому стані (25.13) у вигляді

$$\Psi_e(\vec{r}, t) = A(0) \Psi_a(\vec{r}_A) \varphi_{\{0,0,\dots,0\}}(\vec{q}) \left\{ \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\delta\omega}{2\Omega} \right) e^{-i\frac{E_a + \hbar(\delta\omega/2 - \Omega)t}{\hbar}} + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\delta\omega}{2\Omega} \right) e^{-i\frac{E_a + \hbar(\delta\omega/2 + \Omega)t}{\hbar}} \right\}. \quad (25.29)$$

У такій системі енергія не дорівнює власному значенню  $E_a$  оператора Гамільтона атома, а відповідає існуванню двох ефективних динамічних підрівнів  $\tilde{E}_a = E_a + \hbar(\delta\omega/2 \pm \Omega)$ , що є наслідком розщеплення одного рівня за рахунок взаємодії з модою поля, тобто є своєрідним динамічним ефектом Штарка.

Розглянемо більш детально часову залежність імовірності збудженого стану атома. Із формули (25.26) видно, що характер взаємодії збудженого атома з однією модою має характер незатухаючого коливального процесу з періодичним збудженням атома (переходом з основного стану у збуджений) і зворотним переходом від збудженого стану в основний. Такий процес відповідає періодичному обміну енергією між атомом і модою поля. Частота обміну  $\Omega = \sqrt{(\delta\omega/2)^2 + \Omega_0^2}$  та амплітуда коливань імовірності збудженого стану атома залежать від енергії взаємодії атома з модою  $\Omega_0$  і від спектральної відстройки точного резонансу  $\delta\omega$ . У випадку точного резонансу  $\delta\omega = 0$  маємо

$$W_e(t) = \cos^2 \Omega_0 t. \quad (25.30, a)$$

Очевидно, що внаслідок нормування суми ймовірностей перебування атома та єдиної моди поля у збудженому стані  $|A(t)|^2 + |F_\beta(t)|^2 = 1$  імовірність збудженого стану моди поля при  $\delta\omega = 0$  описується виразом

$$|F_\beta(t)|^2 = \sin^2 \Omega_0 t. \quad (25.30, б)$$

Бачимо, що при  $\delta\omega = 0$  відбувається процес повного обміну збудженням між полем і атомом. Цей ефект є аналогом прецесії Рабі при накладанні періодичного збурення (див. § 20).

Період повторного збудження атома за умови точного резонансу

$$T = \frac{\pi}{\Omega_0} = \frac{\pi\hbar}{|V_{eg}|} = \frac{\pi\hbar}{|\langle \vec{d}_{eg} | \vec{e}_\beta \rangle|} \sqrt{\frac{V_0}{2\pi\hbar\omega_\beta}}$$



визначається величиною матричного елементу енергії взаємодії атома з модою поля (25.11). Видно, що період обміну енергією  $T$  зростає зі збільшенням об'єму квантування поля  $V_0$  і зменшується зі зростанням частоти моди (яка приблизно збігається із частотою атомного переходу) і матричного елементу дипольного моменту атома.

Мінімальний період  $T$  відповідає орієнтації дипольного моменту атома  $\vec{d}$  у напрямку вектора поляризації моди поля  $\vec{e}_\beta$ . Якщо прийняти для дипольного моменту наближену та досить поширену оцінку  $|\vec{d}_{eg}| \approx ea$ , то при такій взаємній орієнтації  $\vec{d}$  і  $\vec{e}_\beta$  період осциляцій процесу самозбудження атома із частотою переходу  $\omega_a \approx 3,5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$  в об'ємі квантування  $V_0 = 10^3 \text{ см}^3$  дорівнює  $T \approx 3 \text{ с}$ .

У тому випадку, коли вектор поляризації моди ортогональний до дипольного моменту атома та  $(\vec{d}_{eg}\vec{e}_\beta) = 0$ , атом не взаємодіє з модою поля, а його стан із часом не змінюється. При збільшенні  $|\delta\omega|$  частота  $\Omega$  обміну енергії між атомом і модою поля збільшується й дорівнює  $\Omega \approx \delta\omega/2$ , а коливання амплітуди ймовірності навпаки, зменшуються. У цьому випадку з розв'язку (25.29) знаходимо

$$|A(t)|^2 = 1 - \frac{1}{1 + (\delta\omega/2\Omega_0)^2} \sin^2 \Omega t, \quad (25.31a)$$

$$|F_\beta(t)|^2 = \frac{1}{1 + (\delta\omega/2\Omega_0)^2} \sin^2 \Omega t. \quad (25.31b)$$

Із цих розв'язків видно, що за умови  $|\delta\omega| \gg \Omega_0$ :

$$|A(t)|^2 \rightarrow 1, \quad |F_\beta(t)|^2 \rightarrow 0, \quad (25.32)$$

тобто при порушенні умови резонансу процес обміну енергією між атомом і модою поля стає практично непомітним. Саме ця обставина й визначає можливість знехтування впливом нерезонансних мод у випадку розрідженого спектра мод електромагнітного поля.

**25.3.2. Взаємодія атома з двома симетрично розташованими резонансними модами поля.** Розглянемо ще один частинний випадок, коли атом одночасно взаємодіє з двома модами поля з номерами  $\beta$  і  $\beta+1$  (рис. 25.1, б). Вважатимемо, що істотний внесок у обчислення

суми  $\sum_\beta |V_{a\beta}|^2 / \hbar^2 (\omega_\beta - \omega_a + \omega)$ , що стоїть у знаменнику виразу для загального розв'язку (25.21), дають тільки моди з частотами  $\omega_\beta$  і  $\omega_{\beta+1}$ , для яких виконуються умови резонансної взаємодії з атомом

$$|\omega_a - \omega_\beta|, |\omega_a - \omega_{\beta+1}| \ll |\omega_a - \omega_{\beta-1}|, |\omega_a - \omega_{\beta+2}|, |\omega_a - \omega_{\beta+3}|, \dots \quad (25.33)$$

Для спрощення розв'язку вважатимемо, що частоти  $\omega_\beta$  і  $\omega_{\beta+1}$  розташовані симетрично щодо частоти  $\omega_a$  переходу в атомі, а саме:

$$\omega_{\beta+1,\beta} = \omega_a \pm \delta\omega/2. \quad (25.34)$$

У символічному вигляді такі умови зображено на рис. 25.1, б. Також вважатимемо, що взаємодія цих мод з атомом характеризується однаковим значенням ефективної частоти взаємодії

$$|V_{a\beta}| = |V_{a,\beta+1}| = \hbar\Omega_0. \quad (25.35)$$

За виконання цих умов з виразу (25.21) знаходимо

$$A(t) = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} \frac{(\omega^2 - (\delta\omega/2)^2) e^{i\omega t} d\omega}{\omega(\omega - \Omega_1)(\omega + \Omega_1)}, \quad (25.36)$$

де

$$\Omega_1 = \sqrt{2\Omega_0^2 + (\delta\omega/2)^2}. \quad (25.37)$$

Із вигляду підінтегральної функції (25.36) очевидно є наявність трьох полюсів у точках

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_{1,2} = \pm\Omega_1 \quad (25.38)$$

на дійсній осі площини комплексних частот  $\omega$ .

Для обчислення інтегралу замкнемо шлях інтегрування дугою нескінченно великого радіуса, що лежить у верхній півплощині. При цьому всі полюси лежать усередині контуру інтегрування (рис. 25.3).

Обчислюючи залишки в полюсах  $\omega_{1,2,3}$  підінтегральної функції (25.36), знаходимо остаточний вираз для амплітуди  $A(t)$  і повної ймовірності збудженого стану атома

$$A(t) = A(0) \left\{ 1 - 4 \left( \frac{\Omega_0}{\Omega_1} \right)^2 \sin^2 \frac{\Omega_1}{2} t \right\}, \quad (25.39)$$

$$W(t) = |A(t)|^2.$$

Амплітуди збудження кожної з двох резонансних мод можна знайти з рівняння (25.14, б).

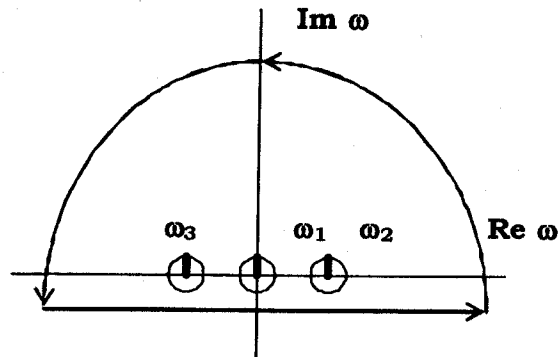


Рис. 25.3. Контур комплексного інтегрування при розрахунку ймовірності спонтанного розпаду атома, зв'язаного з двома модами поля

Якщо виконано додаткову умову  $|V_{\alpha\beta}| \gg \hbar |\delta\omega|$ , то для інтервалу часу  $t \ll 1/|\delta\omega|$  виконується наближення точного резонансу  $|\delta\omega| = 0$  із розв'язків (25.38) і рівняння (25.14, б) випливають вирази для амплітуди та ймовірності збудженого стану атома

$$\begin{aligned} A(t) &\approx A(0) \cos(\sqrt{2}\Omega_0 t), \\ W(t) &= \cos^2(\sqrt{2}\Omega_0 t), \end{aligned} \quad (25.40)$$

а також ймовірності збудженого стану мод поля

$$|F_\beta(t)|^2 \approx |F_{\beta+1}(t)|^2 \approx \frac{1}{2} \sin^2(\sqrt{2}\Omega_0 t). \quad (25.41)$$

Зіставляючи ці результати з (25.37) і (25.40), бачимо, що частота  $\sqrt{8}\Omega_0$  є мінімальною частотою процесу обміну між полем і атомом при взаємодії атома з двома резонансними модами поля.

Таким чином, процес взаємодії атома як з однією, так і двома резонансними модами має періодичний (осцилюючий), а не затухаючий характер. Інакше кажучи, у такій системі ніякого незворотного спонтанного розпаду атома не буде. Якісно подібний випадок буде й у тому разі, коли атом взаємодіє з невеликою кількістю мод поля, частоти яких розташовані несиметрично відносно частоти переходу атома. Тоді закон обміну енергією між атомом і модами поля зазвичай буде відрізнятися від гармонічного закону, який характерний для взаємодії з однією модою або двома симетрично розташованими, проте головна риса процесу залишається незмінною – процес обміну є періодичним і незатухаючим.

### Контрольні запитання

1. Чому спонтанний розпад збудженого атома в ідеальному резонаторі з дискретним спектром мод неможливий?
2. Як залежать ефективність і швидкість обміну енергією між атомом і резонансною модою від відстройки щодо умови точного резонансу?

Література: [2], § 51.

Додаткова література: [VI].

## § 26. Спонтанний розпад атомів у вільному просторі

### 26.1. Особливості спонтанного розпаду збудженого стану при взаємодії атома з квазінеперервним розподілом мод поля у вакуумному стані

Розглянуті особливості взаємодії атома з кількома дискретними модами електромагнітного поля, які перебувають у основному (вакуумному) стані показують, що цей процес є зворотним, періодичним і незатухаючим. Це означає, що в таких умовах ніякого спонтанного розпаду, під яким розуміється незворотна релаксація збудження від атомної системи до поля з одночасним переходом атома зі збудженого стану в основний, не відбувається.

Розглянемо альтернативний випадок, коли моди поля розташовані настільки щільно, що резонансне наближення (тобто виділення взаємодії атома лише з однією або кількома окремими модами) стає принципово неможливим. Для визначення умов існування такого випадку розглянемо розподіл мод поля за спектром.

Спектральну густину мод у об'ємі  $V_0$  можна знайти на підставі тих самих обчислень, які виконано для аналізу спектра можливих станів частинки. Для цього використаємо загальне співвідношення (14.6) для повної кількості квантових станів у об'ємі  $V_0$ :

$$N = g \frac{\Gamma(V_0, p)}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V_0 p^3}{3\pi^2 \hbar^3} = \frac{V_0 \omega^3}{3\pi^2 c^3}, \quad (26.1)$$

у якому використано заміну  $p = \hbar\omega/c$ . При такій заміні це співвідношення визначає повну кількість незалежних мод поля, частоти яких лежать у межах інтервалу  $[0... \omega]$ . Із цього рівняння отримуємо вираз для спектрально-просторової густини мод поля, тобто кількості мод поля різної частоти в об'ємі квантування  $V_0$ , які відповідають одиничному частотному інтервалу:

$$\frac{dN}{d\omega} \equiv \rho(\omega) = \frac{V_0 \omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (26.2)$$

Обернена величина

$$\frac{d\omega}{dN} \equiv \frac{1}{\rho(\omega)} = \frac{\pi^2 c^3}{V_0 \omega^2} \quad (26.3)$$

має зміст спектрального інтервалу між сусідніми (за частотою) модами поля. Видно, що у вільному просторі (при  $V_0 \rightarrow \infty$ ) міжмодовий інтервал прямує до нуля, а спектральна густина відповідно стає нескінченно великою при будь-якій частоті поля  $\omega$ . Ця обставина також означає, що у вільному просторі принципово неможливо забезпечити селективну взаємодію атома з кількома дискретними модами будь-якої (навіть найменшої) частоти.

Водночас при квантуванні поля в скінченних (за об'ємом) системах (напр., у резонаторі поля НВЧ) міжмодова відстань є досить великою. Наприклад, у резонаторі з об'ємом  $V_0 = 10^3 \text{ см}^3$  і при довжині хвилі НВЧ поля  $\lambda = 5 \text{ см}$  ( $\omega \approx 3,5 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$ ) міжмодова відстань дорівнює  $d\omega/dN = 3 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ .

Доцільно нагадати, що спектральна ширина моди в резонаторі з добротністю  $Q$  дорівнює  $\Delta\omega_Q \approx \omega/Q$ . Порівняємо цю величину з міжмодовою відстанню. Наприклад, за реальної величини добротності НВЧ резонатора  $Q = 10^3 - 10^4$  спектральна ширина моди буде  $\Delta\omega_Q \approx 3,5 \cdot (10^6 - 10^7) \text{ с}^{-1}$ . Видно, що дискретно розташовані моди мають спектральну ширину  $\Delta\omega_Q$  у 10–100 разів меншу, ніж міжмодова відстань  $d\omega/dN$ , і внаслідок цього принципово можливо є селекція

мод і взаємодія атома з однією або декількома (2 або 3) найближчими модами.

Принципово інший випадок відповідає оптичному діапазону. Якщо розглянути такий самий за об'ємом  $V_0$  оптичний резонатор (напр., у формі паралелепіпеда із дзеркальними поверхнями), то при довжині хвилі електромагнітного поля  $\lambda = 1 \text{ мкм}$  ( $\omega \approx 2 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ) міжмодова відстань дорівнює малій величині  $d\omega/dN \approx 0,075 \text{ с}^{-1}$ . При типовій для оптичних резонаторів добротності  $Q = 10^6 - 10^7$  спектральна ширина моди на багато порядків більша й дорівнює  $\Delta\omega_Q \approx 2 \cdot (10^8 - 10^9) \text{ с}^{-1}$ . Такий висновок (квазінеперервний характер частотного розподілу мод квантованого поля у високочастотній області спектра електромагнітних хвиль) також впливає із загальної формули для відношення ширини моди до міжмодового інтервалу

$$\frac{\Delta\omega_Q}{d\omega/dN} = \rho(\omega)\Delta\omega_Q \approx \frac{V_0 \omega^3}{\pi^2 c^3 Q} \sim \omega^3. \quad (26.4)$$

Таким чином, для випадку оптичних і більш короткохвильових переходів практично неможливо розрізнити моди та реалізувати взаємодію атома з однією модою або з їх малою кількістю (рис. 26.1).

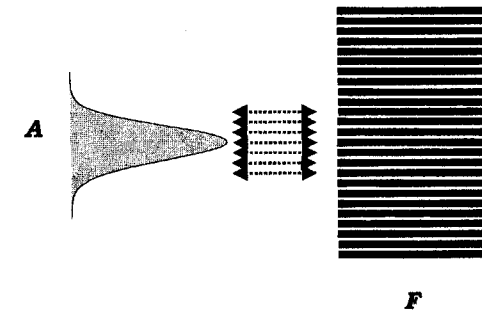


Рис. 26.1. Взаємодія атома  $A$  з квазінеперервним ансамблем мод електромагнітного поля  $F$  у вакуумному стані

Аналізувати задачу необхідно, виходячи із загального розв'язку (25.21):

$$A(t) = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} \frac{e^{i\omega t} d\omega}{\omega - \sum_{\beta} \frac{|V_{\alpha\beta}/\hbar|^2}{(\omega_{\beta} - \omega_{\alpha} + \omega)}}.$$

Розглянемо суму

$$S = \sum_{\beta} |V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2(\omega_{\beta} - \omega_{\alpha} + \omega), \quad (26.5)$$

що стоїть у знаменнику (25.21) і враховує зв'язок між атомом і ансамблем мод квантованого поля. Цю суму можна обчислити, якщо перейти до процедури усереднення взаємної орієнтації різних мод поля щодо матричного елемента, який відповідає за конкретний перехід у атомі (у випадку дипольних переходів – взаємної орієнтації дипольного моменту і векторів поляризації мод поля) і до інтегрування величини  $|V_{\alpha\beta}|^2 / \hbar^2(\omega_{\beta} - \omega_{\alpha} + \omega)$  за всіма можливими частотами  $\omega_{\beta}$  мод з використанням спектральної густини станів  $\rho(\omega_{\beta})$  квантованого поля

$$S = \int_0^{\infty} \rho(\omega_{\beta}) \frac{\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle d\omega_{\beta}}{\hbar^2(\omega_{\beta} - \omega_{\alpha} + \omega)}. \quad (26.6)$$

У дипольному наближенні величину  $|V_{\alpha\beta}|$  можна знайти на основі формули (25.11). Її також можна обчислити, виходячи з наведених нижче простих оцінок.

Енергія взаємодії з атомом однієї моди квантованого електромагнітного поля  $\vec{E}_{\beta}(\vec{r}, t)$ , яка перебуває у вакуумному стані й має енергію  $\hbar\omega_{\alpha\beta}/2$ , визначається стандартним виразом

$$V = -\vec{d}\vec{E}_{\beta} = -(\vec{d}\vec{e}_k)E_{\beta}. \quad (26.7)$$

У цьому співвідношенні  $\vec{d} = e\vec{r}$  є дипольним моментом атома, а величина  $\vec{e}_k$  – одиничним вектором поляризації моди. Після визначення матричних елементів та формальної процедури усереднення маємо

$$\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle = \langle \vec{d}_{\alpha\beta}\vec{e}_k | \rangle_{Q,\varphi} \langle E_{\beta} |^2 \rangle. \quad (26.8)$$

Величину

$$\langle E_{\beta} |^2 \rangle = \frac{2\pi\hbar\omega_{\beta}}{V_0} \quad (26.9)$$

можна знайти, якщо врахувати, що повна енергія моди  $\hbar\omega_{\beta}/2$  в основному (вакуумному) стані визначається добутком середньої густини енергії електромагнітного поля  $\langle E_{\beta} |^2 \rangle / 4\pi$  на об'єм моди  $V_0$ .

Після просторового усереднення

$$\langle |\vec{d}_{\alpha\beta}\vec{e}_k|^2 \rangle_{Q,\varphi} = |\vec{d}_{\alpha\beta}|^2 \langle \cos^2 \theta \rangle_{4\pi} = |\vec{d}_{\alpha\beta}|^2 / 3 \quad (26.10)$$

знаходимо остаточний вираз для (26.8):

$$\langle |V_{\alpha\beta}|^2 \rangle = \frac{2\pi\hbar\omega_{\beta} |\vec{d}_{\alpha\beta}|^2}{3V_0}. \quad (26.11)$$

З урахуванням цього результату вирази (26.5) і (26.6) набувають такого вигляду:

$$S = \frac{2}{3\pi\hbar c^3} \int_0^{\infty} \frac{|\vec{d}_{\alpha\beta}|^2 \omega_{\beta}^3 d\omega_{\beta}}{(\omega_{\beta} - \omega_{\alpha} + \omega)}. \quad (26.12)$$

Додатково перетворимо його з урахуванням ще однієї дуже важливої обставини. Збіжність інтегралу у виразі (26.12) забезпечується тим, що матричний елемент  $\vec{d}_{eg}(\omega_{\beta})$  зі зростанням різниці  $|\omega_{\beta} - \omega_{\alpha}| \rightarrow \infty$  спадає за експоненціальним законом. Цей спад значно швидший, ніж зростання степеневі функції  $\omega_{\beta}^3$  у чисельнику підінтегрального виразу при  $\omega_{\beta} \rightarrow \infty$ . У наявності такого експоненціального спаду легко переконатися, пригадавши правило отримання дипольного наближення в теорії взаємодії електромагнітного поля з атомами (§ 22). Воно полягає в нехтуванні зміною фази електромагнітного поля  $\vec{E}_{\beta} \sim e^{-i\vec{k}_{\beta}\vec{r}}$  при обчисленні матричного елемента енергії взаємодії поля з атомом:

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta} &= \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r}) (\vec{E}_{\beta} \hat{p}) \Psi_{\beta}(\vec{r}) d^3r \sim \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}_{\beta}\vec{r}} (\vec{e}_{\beta} \hat{p}) \Psi_{\beta}(\vec{r}) d^3r \sim \\ &\sim \int \Psi_{\alpha}^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}_{\beta}\vec{r}_a} (\vec{d}\vec{e}_{\beta}) \Psi_{\beta}(\vec{r}) d^3r = e^{-i\vec{k}_{\beta}\vec{r}_a} (\vec{d}_{\alpha\beta}\vec{e}_{\beta}) \end{aligned} \quad (26.13)$$

у межах атома та заміною його на одиницю. Очевидно, що таким чином можна діяти лише в тому разі, коли частота поля задовольняє умову

$$|\vec{k}_{\beta}(\vec{r} - \vec{r}_a)|_{\max} = \omega_{\beta} |(\vec{r} - \vec{r}_a)\vec{k}_{\beta} / c k_{\beta}|_{\max} \leq \omega_{\beta} a / c \ll 1,$$

яку можна виконати, коли частота поля  $\omega_{\beta}$ , що є змінною інтегрування в (26.12), обмежена максимальним значенням  $|\omega_{\beta}| \ll c/a$  (де  $a$  є ефективним розміром атома). Те саме спостерігається й для переходів довільної мультипольності. Очевидно, що в протилежному випадку  $|\omega_{\beta}| \gg c/a$  (що справедливо при формальному розширенні меж інтегрування  $|\omega_{\beta}| \rightarrow \infty$  у процесі обчислення комплексного інтегралу у виразі (26.12)) цей фазовий множник стає швидкоосцилюючою функцією частоти, що веде до експоненціальної малости енергії взаємодії. Виходячи із наведених умов стає очевидним, що межі інтегрування

в (26.12) можна розширити до інтервалу  $[-\infty, \infty]$ . Дуже важливою є та обставина, що вираз (26.12), а разом з ним і вирази для амплітуди  $A(t)$  та ймовірності збудженого стану атома  $W(t) = |A(t)|^2$ , не залежать від величини об'єму квантування  $V_0$ .

Інтеграл (26.12) можна обчислити за допомогою комплексного інтегрування. Спочатку зауважимо, що кінцевий вираз для досліджуваної величини  $A(t)$  визначається, як це видно зі структури підінтегрального виразу (26.12), полюсами цього підінтегрального виразу при одній або кількох значеннях комплексної частоти  $\omega = \omega' + i\omega''$ . Очевидно, що положення цих полюсів, які визначають часову зміну амплітуди ймовірності  $A(t)$  перебування атома у збудженому стані, характеризуються малими значеннями  $\omega$  порівняно із частотою  $\omega_a$ , яка визначає часову зміну самої хвильової функції (ця обставина безпосередньо випливає з представлення (25.13)).

У математичній фізиці показано, що функція  $(\omega_\beta - \omega_a + \omega)^{-1}$  аргументу  $(\omega_\beta - \omega_a)$ , яка входить до складу підінтегрального виразу в (26.12), у випадку малізми уявної частини комплексної величини  $\omega$  виступає подібно до  $\delta$ -функції, її можна представити у вигляді

$$\frac{1}{(\omega_\beta - \omega_a + \omega' + i\omega'')} = \pi i \delta(\omega_\beta - \omega_a + \omega') + \hat{P} \frac{1}{(\omega_\beta - \omega_a + \omega')}, \quad (26.14)$$

у якому оператор  $\hat{P}$  визначає обчислення головного значення інтегралу за Коші. Використовуючи це співвідношення, знаходимо

$$S = i \frac{\Gamma_0}{2} + \Delta\omega_0; \quad (26.15)$$

$$\frac{\Gamma_0}{2} = \frac{2(\omega_a - \omega')^3}{3\hbar c^3} |\bar{d}_{a\beta}(\omega_a - \omega')|^2 \approx \frac{2\omega_a^3}{3\hbar c^3} |\bar{d}_{a\beta}(\omega_a)|^2,$$

$$\Delta\omega_0 = \hat{P} \int_0^\infty \frac{2\omega_\beta^3 |\bar{d}_{a\beta}(\omega_\beta)|^2 d\omega_\beta}{3\pi\hbar c^3 (\omega_\beta - \omega_a + \omega)}$$

Показано, що частота  $\omega$  є малою величиною порівняно із частотою  $\omega_a$ , унаслідок чого в останніх виразах ми знехтували малою дійсною величиною  $\omega'$ . Підставляючи (26.15) у загальний вираз для  $A(t)$  (25.21) та обчислюючи залишок у точці  $\omega = i\Gamma_0/2 + \Delta\omega_0$ , знаходимо остаточну формулу, яка описує спонтанний розпад збудженого атома при його взаємодії з квазінеперервно розподіленими модами поля

$$A(t) = \frac{A(0)}{2\pi i} \int_{-\infty - i\delta}^{\infty - i\delta} \frac{e^{i\omega t} d\omega}{\omega - i\frac{\Gamma_0}{2} - \Delta\omega_0} = A(0) e^{-i\frac{\Gamma_0}{2}t - \Delta\omega_0 t}. \quad (26.16)$$

Якщо згадати, що повна хвильова функція атома, яка відповідає збудженому стану, відповідно до принципу суперпозиції (25.13) характеризується функцією  $\Psi_e(\vec{r}, t) = A(t)\Psi_{a0}(\vec{r})e^{-iE_a t/\hbar}$ , то вирази для хвильової функції повної системи (атом + поле) у збудженому стані атома та ймовірності його залишатись у момент часу  $t \geq 0$  у збудженому стані набувають такого остаточного вигляду:

$$\Psi_e(\vec{r}, t) = A(t)\Psi_{a0}(\vec{r}) = A(0)\Psi_{a0}(\vec{r}) e^{-i\frac{E_a + \hbar\Delta\omega_0}{\hbar}t} e^{-\frac{\Gamma_0}{2}t}, \quad (26.17)$$

$$W_e(t) = |A(t)|^2 = e^{-\Gamma_0 t} \equiv e^{-t/\tau}.$$

Величина

$$\tau = \frac{1}{\Gamma_0} = \frac{3\hbar c^3}{4\omega_a^3 |\bar{d}_{a\beta}(\omega_a)|^2} \quad (26.18)$$

визначає час життя збудженого атома щодо радіаційного розпаду (це той час, за який ймовірність атома залишатись у збудженому стані зменшується в  $e \approx 2,7$  разів).

Із вигляду хвильової функції (26.17) випливає, що в такій системі енергія збудженого стану атома  $E_a + \hbar\Delta\omega_0$  не дорівнює власному значенню оператора Гамільтона атома  $E_a$  (як це було б за відсутності взаємодії між атомом і полем), а характеризується *радіаційним (польовим) зсувом*  $\Delta\omega_0$  (зсув Лемба) відносно  $E_a$ . Причиною цього зсуву є процес взаємодії атома з модами поля, а величина зсуву залежить як від характеристик атома, так і від властивостей поля. Величину зсуву можна обчислити методами квантової електродинаміки, враховуючи взаємодію атома з усіма модами поля. Приведемо просту оцінку для зсуву Лемба для  $s$ -стану атома із зарядом ядра  $Ze$ :

$$\Delta\omega_0 \approx \frac{4}{3\pi} \frac{Z^4 e^2}{n^3 \hbar} a^2 \ln[1/(Z\alpha)^2],$$

де  $\alpha \approx 1/137$  – стала тонкої структури,  $n$  – головне квантове число,  $a$  – борівський радіус. Для станів з  $l > 0$  величина зсуву приблизно в 100 разів менша. Наприклад, у випадку атомів водню експериментальне значення зсуву Лемба становить:

$$\Delta\omega_0 = 1034 \text{ Мгц (для рівня } 2s_{1/2});$$

$$\Delta\omega_0 = 17 \text{ Мгц (для рівня } 2p_{1/2});$$

$$\Delta\omega_0 = 8 \text{ МГц (для рівня } 2p_{3/2}).$$

Для більш важких атомів цей зсув істотно збільшується:

$$\Delta\omega_0 = 14063 \text{ МГц (для рівня } 2s_{1/2} \text{ гелію);}$$

$$\Delta\omega_0 = 62765 \text{ МГц (для рівня } 2s_{1/2} \text{ літію);}$$

$$\Delta\omega_0 = 221500 \text{ МГц (для рівня } 2s_{1/2} \text{ вуглецю).}$$

## 26.2. Порівняльний аналіз процесів взаємодії атома з дискретним і квазінеперервним ансамблями мод квантованого електромагнітного поля в основному (вакуумному) стані

Із (26.17) випливає, що процес взаємодії збудженого атома з квазінеперервним ансамблем квантованих мод електромагнітного поля відповідає монотонно затухаючому та незворотному спонтанному розпаду атома  $W_e(t) = |A(t)|^2 = e^{-t/\tau}$ . З іншого боку, проведений послідовний аналіз процесу аналогічної резонансної взаємодії збудженого атома з однією модою поля приводить до принципово іншого результату – періодичного, гармонічного та незатухаючого процесу обміну енергією збудження між атомом і модою поля. У цьому випадку ймовірність перебування атома у збудженому стані описується іншим виразом, який при точному частотному резонансі між атомом і модою має вигляд (25.30, а):  $W(t) = |A(t)|^2 = \cos^2 \Omega_0 t$ . Якщо розглянути взаємодію атома з кількома дискретними модами, то якісний результат залишається таким самим, як і у випадку однієї моди – процес незворотного розпаду відсутній, а характер взаємодії відповідає періодичному (хоча й негармонічному) закону періодичного самозбудження атома.

Виникає законне запитання, чому аналогічні процеси взаємодії атома зі скінченною та нескінченною кількістю мод приводять до принципово різних результатів (осцилюючому та затухаючому режимам взаємодії)? Для цього ще раз проаналізуємо відповідні процеси взаємодії. У загальному випадку процес взаємодії атома з модами поля описується нескінченною системою пов'язаних рівнянь (25.14). У випадку взаємодії тільки з однією модою та за умови точного резонансу ця квантово-електродинамічна система спрощується до системи двох зв'язаних осциляторів і має вигляд

$$\frac{\partial A(t)}{\partial t} = F_\beta(t) e^{-i\pi(V_{\alpha\beta}/\hbar)}, \quad (26.19, \text{ а})$$

$$\frac{\partial \{F_\beta(t) e^{i\pi}\}}{\partial t} = A(t) (V_{\alpha\beta}^*/\hbar). \quad (26.19, \text{ б})$$

Із системи (26.19) видно, що процес взаємодії атома з модою дійсно характеризується як їх прямим зв'язком (похідна однієї величини залежить від значення другої), так і наявністю різниці фаз  $\pi$  між станами атома й поля. Величини  $A(t)$  і  $F_\beta(t)$  змінюються в протифазі – при зменшенні  $|A(t)|$  (тобто при  $\partial A(t)/\partial t < 0$ ) відбувається зростання  $|F_\beta(t)|$ , а при зменшенні  $|F_\beta(t)|$  (при  $\partial \{F_\beta(t) e^{i\pi}\}/\partial t < 0$ ) відбувається зростання  $|A(t)|$ . Фактично атом і мода поля є зв'язаними осциляторами, які коливаються в протифазі. Процеси передачі енергії між ними залежать від фаз коливань цих осциляторів: кожний раз при повному зворотному "переході" збудження від поля до атома фаза коливань у моді поля завжди буде однаковою й дорівнюватиме  $\Omega_0 t = n\pi$ . Атом буде періодично самозбуджуватись до максимальної ймовірності  $|A(t)|^2 = 1$  у моменти часу  $t_n = nT$ , а ймовірність збудження поля буде максимальною ( $|F_\beta(t)|^2 = 1$ ) у моменти часу  $t_n = (n + 1/2)T$ . Період самозбудження за умови точного резонансу дорівнює  $T = \pi/\Omega_0 = \pi\hbar/|V_{\alpha\beta}|$  і визначається величиною матричного елемента  $V_{\alpha\beta}$  енергії взаємодії атома з модою поля. Унаслідок відсутності механізмів дисипації енергії в цій системі такий процес є нескінченним, хоча зазвичай у реальних експериментах із селекцією мод механізми дисипації завжди існують (напр., затухання поля моди за рахунок втрат на поверхні, що обмежує об'єм квантування). Процес фазованого взаємообміну енергією збудження між атомом і резонансною модою поля показано на рис. 26.2.

Розглянемо процес взаємодії атома з великим (квазінеперервним) ансамблем мод поля. У цьому випадку динаміка процесу взаємодії описується нескінченною системою пов'язаних між собою рівнянь (25.14), які можна переписати в зручному для аналізу вигляді

$$\frac{\partial A(t)}{\partial t} = \sum_{\beta} F_\beta(t) e^{-i\pi(V_{\alpha\beta}/\hbar)} e^{-i(\omega_\beta - \omega_a)t}, \quad (26.20\text{а})$$

$$\frac{\partial F_\beta(t)}{\partial t} = A(t) e^{i\pi(V_{\alpha\beta}^*/\hbar)} e^{-i(\omega_a - \omega_\beta)t}. \quad (26.20\text{б})$$

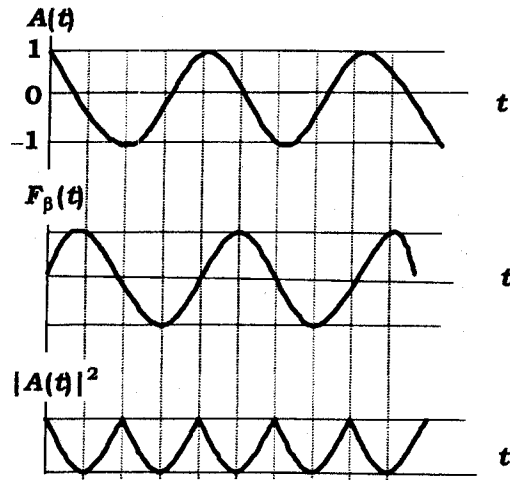


Рис. 26.2. Фазований взаємообмін енергії збудження між атомом і єдиною резонансною модою поля

Із цих рівнянь видно, що кожна мода поля також перебуває щодо атома у стані з відносним зсувом фаз на  $\pi$ . Принципова різниця між цими процесами полягає лише в дуже великій кількості мод, взаємодія з якими є суттєвою для поточного стану атома. При цьому виникає цікава ситуація: якщо процес обміну збудженням між атомом і кожною модою є взаємно зворотним, характеризується тільки ефективністю взаємодії, яка на основі виконання певних фазових співвідношень визначає період  $T = \pi / \Omega_0 = \pi \hbar / |V_{a\beta}|$  взаємної передачі збудження, то процес взаємодії атома з ансамблем мод має врахувати фазові співвідношення у взаємодії з усіма модами.

Із принципу суперпозиції випливає, що процес передачі збудження від атома до ансамблю мод у будь-який момент часу відповідає когерентній (тобто з урахуванням фаз) взаємодії атома з кожною з мод поля. Очевидно, що цей процес починається з того, що в момент часу  $t = 0$  атом є збудженим, а всі моди поля перебувають у основному (незбудженому) стані. На початковому етапі відбувається процес передачі збудження від атома до всіх мод поля з відповідним зростанням амплітуд  $F_\beta(t)$ , які характеризують зміну ймовірності збудження цих мод. Спочатку цей процес є однонаправленим, тобто відбувається тільки зменшення амплітуди збудженого стану атома, що описується від'ємним значенням похідної  $\partial A(t)/\partial t$  у першому рівнянні системи (26.20, а) за умови  $|\omega_\beta - \omega_a| t < \pi$ . Через деякий час моди, які мають

найбільшу частотну відстройку від частоти переходу атома  $|\omega_\beta - \omega_a|$  (і водночас достатньо велику енергію взаємодії з атомом), змінюють свій фазовий стан на  $\pi$ , тобто для них починає виконуватись умова  $|\omega_\beta - \omega_a| t > \pi$ . При цьому ці моди, як зв'язані з атомом осцилятори, мають почати віддавати свою енергію атома (як це відбувається в процесі взаємодії атома тільки з однією модою поля) і відповідно збільшувати як похідну  $\partial A(t)/\partial t$ , так і саму амплітуду  $A(t)$ . Однак саме в цей час інші моди, положення яких відповідає меншій частотній розстройці  $|\omega_\beta - \omega_a|$ , змінюють свою фазу на величину, меншу від  $\pi$ , і тому продовжують відбирати енергію від атома, зменшуючи цю похідну.

Таким чином, одночасно відбуваються протилежно орієнтовані процеси – передача енергії від одних мод поля до атома і відповідно передача енергії від атома до інших мод. При цьому кожний із членів суми в правій частині першого рівняння системи (26.20, а) вносить свій, але з різним знаком, внесок у похідну  $\partial A(t)/\partial t$ . Якщо врахувати, що частоти мод розташовані дуже щільно, то наявність протилежних процесів (відбирання та поглинання енергії від атома) приводить до їх взаємної компенсації й до кінцевого фіксованого основного (незбудженого) стану атома. Це зображено на рис. 26.3 для мод з номерами  $\beta, \beta+1, \beta+2, \dots$  і характеризує зміну із часом як амплітуд збудження цих мод, так і остаточний вираз закону зміни стану атома.

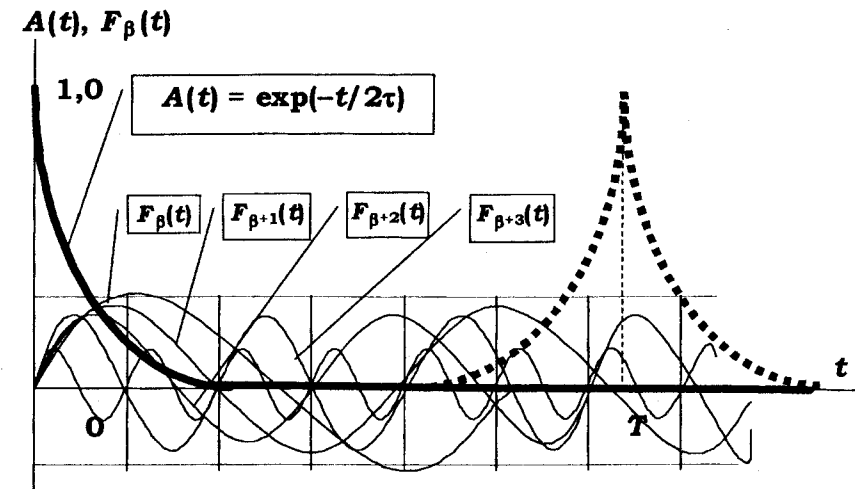


Рис. 26.3. Взаємозв'язок між взаємно фазованими процесами, які характеризують обмін енергією збудження між атомом і окремими модами та підсумковим незворотним спонтанним розпадом атома

На початковій стадії взаємодії (коли всі моди поля описували коливання з малою взаємною різницею фаз  $|\omega_\beta - \omega_a| t < \pi$ , і внаслідок чого направленість процесу передачі енергії була однаковою для всіх мод і відповідала їх збудженню) спостерігалось спадання амплітуди  $A(t)$ . Це спадання загальмувалось, коли для мод з великою різницею частот  $|\omega_\beta - \omega_a|$  почала виконуватись умова зміни фази на величину, що перевищує  $\pi$ . І, нарешті, коли розподіл фаз мод поля набув суто випадкового характеру (з рівномірним розподілом фаз у інтервалі  $[0, 2\pi]$ ), процес спонтанного розпаду повністю завершився.

Фактично процес збудження великої кількості різночастотних мод з повністю випадковими (для часу  $t > \tau$ ) фазами є значною мірою еквівалентним передачі енергії (тобто релаксації) у термостат з великою кількістю ступенів свободи (з великою теплоємністю). Водночас існує відмінність цього процесу від звичайних релаксаційних процесів зі збільшенням ентропії. Справа в тому, що розглянутий процес спонтанного розпаду є принципово зворотним, хоча на практиці ця зворотність практично неможлива. Для обґрунтування такої тези розглянемо передумови того, що всі моди поля після отримання енергії від атома в момент часу  $t$  перебуватимуть у інший момент часу  $t + \Delta t$  в однаковому (з точністю до неістотної величини  $2\pi n_\beta \pi$ ) фазовому стані й здатні віддавати енергію атома.

Очевидно, що самофазований стан можливий тоді, коли залежна від часу повна фаза  $[\vec{k}_\beta \vec{r} - \omega_\beta(t + T) + \varphi_\beta]$  для кожної з мод поля в момент часу  $(t + \Delta t)$  і в точці  $\vec{r}$  буде такою, як у початковий момент часу  $t$  при передачі збудження від атома (який перебуває в точці  $\vec{r}$ ) до всіх мод поля

$$[\vec{k}_\beta \vec{r} - \omega_\beta(t + T) + \varphi_\beta] \pm 2n_\beta \pi = [\vec{k}_\beta \vec{r} - \omega_\beta t + \varphi_\beta], n_\beta = 0, 1, 2, \dots \quad (26.21)$$

Розглянутий випадок якісно подібний до того, який відбувається при самосинхронізації мод у лазерах. Унаслідок дуже великої кількості мод, кожна з яких має свою частоту  $\omega_\beta$ , цей процес вимагає багато часу. Навіть, якщо припустити, що атом весь час перебуватиме в тому самому місці простору (при тому самому значенні  $\vec{r}$ ) і прийняти модель, згідно з якою моди мають еквідистантний спектр із фіксованим для частоти даного атомного переходу  $\omega_a$  міжмодовим інтервалом (26.3):

$$\frac{d\omega}{dN} \equiv \frac{1}{\rho(\omega_a)} = \frac{\pi^2 c^3}{V_0 \omega_a^2},$$

то процес самофазування вимагає часу

$$T = 2\pi\rho(\omega_a) = \frac{2\omega_a^2 V_0}{\pi^2 c^3}. \quad (26.22)$$

Цей інтервал часу характеризує процес самоорганізації (самоупорядкування) і відповідає відомому в процесах синергетики *граничному циклу Пуанкаре* для системи з багатьма ступенями свободи. Очевидно, що у випадку вільного простору (при  $V_0 \rightarrow \infty$ ) цей процес (відповідно до (26.22)) вимагає нескінченно великого часу. У випадку скінченного об'єму квантування (напр., при  $V_0 = 10^3 \text{ см}^3$ ) і для атома з оптичним переходом ( $\omega_a = 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ) таке самофазування можливе для досить помірного інтервалу часу  $T \approx 6 \text{ с}$ . Через такий інтервал часу і за виконання накладених вище обмежень усі моди поля будуть взаємно фазованими й відбудеться процес когерентної передачі енергії від поля до атома, тобто буде спостерігатись процес самозбудження атома.

Насправді (на жаль) явище повного самозбудження атома є неможливим через деякі причини. По-перше, унаслідок того, що спектр мод квантованого поля у вільному просторі не є еквідистантним, а залежить від частоти за квадратичним законом  $dN/d\omega \sim \omega^2$  (26.2), принципово неможливо забезпечити виконання умови  $\omega_\beta T = \pm 2n_\beta \pi, n_\beta = 0, 1, 2, \dots$ , що випливає з (26.21), одночасно для всіх мод поля. По-друге, навіть тоді, коли б вдалося забезпечити виконання умови самофазування  $\omega_\beta T = \pm 2n_\beta \pi, n_\beta = 0, 1, 2, \dots$  для великої групи мод (напр., за рахунок виготовлення резонатора з матеріалу згідно із законом частотної дисперсії, для якого спектр мод був би еквідистантним), велика тривалість  $T$  процесу самофазування призведе до того, що випромінений атомом у систему мод поля фотон буде поглинений стінками резонатора раніше, ніж виконається умова (26.21) самосинхронізації мод.

Справді, оскільки тривалість процесу самофазування  $T \approx 6 \text{ с}$  є дуже великою щодо часу проходження фотона між двома стінками резонатора  $T_1 \approx L/c = V_0^{1/3}/c = 3 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ , то за час  $T$  фотон має  $T/T_1 \approx 10^{10}$  разів відбитися від стінок з імовірністю (коефіцієнтом відбиття)  $R < 1$ . У кращих оптичних резонаторах  $R \approx 0,99 - 0,999$ . За такого значення  $R$  імовірність, що за час  $T$  фотон не поглинеться стінками й братиме участь у процесі самозбудження атома, дорівнюватиме зникаюче малій величині  $W_T = R^{T/T_1} \rightarrow 0$ . Водночас слід заува-



жити, що в мікрохвильовому діапазоні, для якого добротність над-провідникових резонаторів великого розміру може сягати дуже великих значень  $Q \geq 10^5 - 10^7$ , ефект інвертованого самозбудження атома (молекули) є цілком реальним.

Остання обставина показує, що з погляду практичного застосування явища керування характеристиками спонтанного розпаду необхідно враховувати взаємодію не тільки атома з електромагнітними модами поля, але й взаємодію цих самих мод поля з оточуючими об'єктами (з деяким ефективним екраном  $S$ , який розміщений за межами атома). Відповідну схему такої взаємодії символічно зображено на рис. 26.4.

Задача керованого впливу на спонтанний розпад атомів є значно складнішою, ніж розглянута вище задача взаємодії тільки між двома об'єктами (атомом і полем). Її розв'язок показує, що підсумковий характер спонтанного розпаду атома істотно залежить від характеристик екрана  $R$  і від властивостей квантованих мод поля. У найбільш оптимальному випадку, коли екран виготовлений з ідентичних досліджуваному (але незбуджених) атомів і коли ці моди поля спочатку були взаємно синхронізованими, можлива зміна часу життя збуджених атомів на кілька порядків, причому як у бік гальмування розпаду, так і в бік його прискорення.

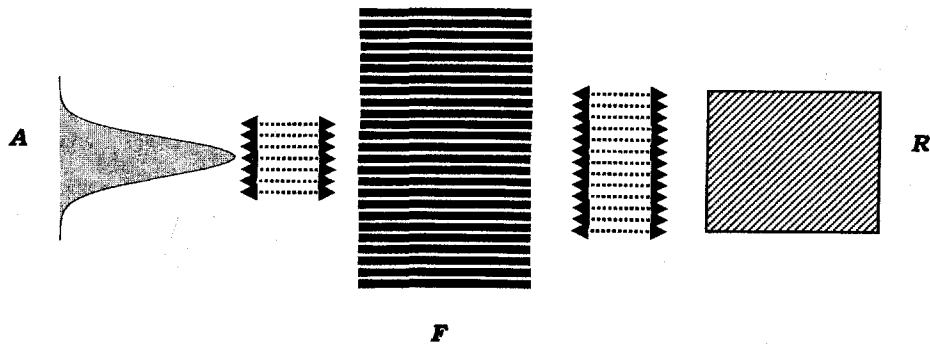


Рис. 26.4. Взаємодія атома  $A$  з квазінеперервним ансамблем мод електромагнітного поля  $F$  у вакуумному стані, які також взаємодіють з екраном (системою інших атомів  $R$ )

На основі виконаних розрахунків були успішно проведені експерименти з керування часом життя радіоактивних ядер за рахунок використання впливу віддаленого екрана на процес спонтанного електромагнітного розпаду ядер.

### 26.3. Спонтанне випромінювання та вимушені переходи у квантових системах

Використання отриманого виразу (26.18) для часу життя квантової системи дозволяє по-іншому оцінити процес вимушених переходів, які відбуваються у квантовій системі під дією електромагнітного випромінювання. Імовірність вимушеного переходу (22.17) між двома резонансними рівнями під дією зовнішнього поля з інтенсивністю  $J_0$  і частотою  $\omega$ , усереднена за взаємною орієнтацією дипольного моменту атома та вектора поляризації поля, описується виразом

$$\langle P_{nm} \rangle = \langle P_{nm}(\omega_{nm} - \omega) \rangle = \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar^2 c} |\bar{d}_{nm}|^2 \delta(\omega_{nm} - \omega). \quad (26.23)$$

Він був отриманий, виходячи з моделі, згідно з якою всі резонансні рівні енергії є стаціонарними, а їх ширина дорівнює нулю. Такий процес не враховував зв'язок між атомом і квазінеперервно розподіленими модами поля у вакуумному стані. Наявність такого зв'язку приводить до двох важливих обставин.

Перш за все, треба врахувати, що відбувається спонтанний розпад збуджених станів атома, які при цьому стають нестаціонарними, а це веде до уширення рівнів. Спектр спонтанного випромінювання, який відповідає нестаціонарному стану із хвильовою функцією (26.17), визначається нормованою функцією

$$F(\omega_{nm}) = \frac{\Gamma_0/2\pi}{(\omega_{nm} - \omega_{nm0})^2 + (\Gamma_0/2)^2}, \quad \omega_{nm0} = \frac{E_n + \hbar\Delta\omega_0 - E_m}{\hbar}, \quad (26.24)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega_{nm}) d\omega_{nm} = 1.$$

Ця функція також відображає структуру спектрального уширення збудженого стану резонансного переходу в атомі. Виходячи з цього, вираз для повної ймовірності переходу (26.23) слід усереднити, привівши до такого вигляду:

$$P_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle P_{nm}(\omega_{nm} - \omega) \rangle F(\omega_{nm}) d\omega_{nm} = \frac{4\pi^2 J_0}{3\hbar^2 c} |\bar{d}_{nm}|^2 \frac{\Gamma_0/2\pi}{(\omega - \omega_{nm0})^2 + (\Gamma_0/2)^2}. \quad (26.25)$$

Очевидно, що у випадку  $\Gamma_0 \rightarrow 0$  вираз (26.25) зводиться до формули (26.23).

Друга обставина полягає в можливості заміни матричного елементу переходу в (26.25) на величину

$$|\bar{d}_{nm}|^2 = \frac{3\hbar c^3}{4\omega_{nm}^3 \tau}, \quad (26.26)$$

яка випливає із формули (26.18). Після такої заміни отримуємо

$$P_{nm} = \frac{2\pi c^2 J_0}{\hbar \omega_{nm}^3 \Gamma_0 \tau} \frac{1}{1 + \left(2 \frac{\omega - \omega_{nm0}}{\Gamma_0}\right)^2}. \quad (26.27)$$

Якщо від енергетичної інтенсивності електромагнітного поля  $J_0$  перейти до потокової інтенсивності  $I_0 = J_0 / \hbar \omega_{nm}$ , то отримаємо

$$P_{nm} = I_0 \frac{\lambda_{nm0}^2}{2\pi} \frac{1}{\Gamma_0 \tau} \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_{nm0}}{\Gamma_0/2}\right)^2}, \quad \lambda_{nm0} = \frac{2\pi c}{\omega_{nm0}}. \quad (26.28)$$

Якщо ввести повний  $\sigma(\omega)$  і резонансний  $\sigma_0(\omega)$  ефективні (електродинамічні) перерізи взаємодії атома з електромагнітним полем

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_{nm0}}{\Gamma_0/2}\right)^2}, \quad \sigma_0 \equiv \sigma(\omega = \omega_{nm0}) = \frac{\lambda_{nm0}^2}{2\pi} \frac{1}{\Gamma_0 \tau}, \quad (26.29)$$

то вираз для ймовірності взаємодії набуває гранично простого вигляду

$$P_{nm} = I_0 \sigma(\omega). \quad (26.30)$$

Із (26.29) та (26.30) видно, що ефективний переріз (або просто переріз)  $\sigma(\omega)$  залежить від довжини хвилі  $\lambda_{nm0}^2$ , від параметра відносного уширення резонансного переходу  $\Gamma_0 \tau$ , а також від відхилення від точного резонансу  $2|\omega - \omega_{nm0}|/\Gamma_0$ . Цей переріз не збігається з геометричним перерізом атома  $\sigma_{\text{геом}} \approx \pi a^2 = \pi(\hbar^2 / \mu e^2)^2 \approx 10^{-18} \text{ см}^2$  і може відрізнятись від нього на багато порядків (як у бік збільшення, так і зменшення).

Для резонансних переходів, де єдиною причиною уширення є спонтанний розпад атома, спектральна ширина лінії відповідає радіаційній (природній) ширині  $\Gamma_0 = 1/\tau$  і відносне уширення дорівнює

$\Gamma_0 \tau = 1$ . Однак такий випадок винятковий і існує лише при реалізації добре відомого в ядерній фізиці ефекту Месбауера.

Для атомної фізики типовою є інша ситуація, коли повна ширина лінії  $\Gamma = \Gamma_0 + \Delta\Gamma$ , де  $\Delta\Gamma \gg \Gamma_0$  є додатковим уширенням спектральної лінії за рахунок різних механізмів так званого однорідного уширення. Нагадаємо, що *однорідним уширенням* називають таке уширення спектральної лінії системи атомів, при якому воно буде однаковим для кожного з атомів (у цьому випадку спектр системи атомів збігається зі спектром окремого атома). Для такого уширення нормована функція розподілу залишається лоренцевою і збігається з (26.24) з відповідною заміною  $\Gamma_0 \rightarrow \Gamma = \Gamma_0 + \Delta\Gamma$ . Причиною однорідного уширення можуть бути, наприклад, швидкі флуктуації параметрів системи, дуже часті й випадкові зіткнення атомів у щільному газі тощо.

При однорідному уширенні відбувається дуже значне зменшення як повного, так і резонансного перерізів  $\sigma_0 \sim 1/(1 + \Delta\Gamma\tau)$ . Наприклад, в активному середовищі рубінового лазера (у кристалі  $\text{Cr}^{3+}$ ) природна ширина лазерного переходу з довжиною хвилі  $\lambda_{nm0} \approx 0,5 \text{ мкм}$  дорівнює  $\Gamma_0 \approx 300 \text{ с}^{-1}$  – це відповідає часу життя  $\tau \approx 3 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ , а повна ширина дорівнює  $\Gamma \approx 10^9 - 10^{10} \text{ с}^{-1}$ , що відповідає дуже великому відносному уширенню  $\Gamma\tau \approx 3 \cdot (10^6 - 10^7)$ , яке різко зменшує переріз взаємодії атомів з випромінюванням. Враховуючи ці зауваження, можна записати вираз для резонансного перерізу в остаточному вигляді

$$\sigma_0 = \frac{\lambda_{nm0}^2}{2\pi} \frac{1}{\Gamma\tau} = \frac{\lambda_{nm0}^2}{2\pi} \frac{1}{(1 + \Delta\Gamma\tau)}. \quad (26.31)$$

Доцільно нагадати, що іншим граничним випадком уширення є *неоднорідне уширення*, при якому спектр поглинання (випромінювання) кожного з атомів є набагато меншим, ніж відповідний спектр системи атомів. Такий ефект відповідає, наприклад, доплерівському уширенню в газі низького тиску із шириною

$$\Delta\omega_D = \omega_{nm0} \sqrt{(k_b T / M_a c^2) \ln 2}$$

і гауссовою функцією розподілу

$$F(\omega_{nm}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta\omega_D} e^{-\frac{(\omega_{nm} - \omega_{nm0})^2}{2\Delta\omega_D^2}}, \quad (26.32)$$

де  $M_a$  – маса атома.

Механізм неоднорідного уширення викликаний формуванням статистичного розподілу зсувів спектральних ліній окремих атомів за рахунок ефекту Доплера та пов'язаних з розподілом проекцій швидкостей руху цих атомів на напрямок випромінювання (поглинання). Після відповідного усереднення величини (26.23) за допомогою (26.32) і використання заміни (26.26) отримуємо вираз для ймовірності вимушеного переходу у випадку неоднорідного гауссового уширення

$$P_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \langle P_{nm}(\omega_{nm} - \omega) \rangle F(\omega_{nm}) d\omega_{nm} = I_0 \sigma(\omega),$$

$$\sigma(\omega) = \sigma_0 e^{-\frac{(\omega - \omega_{nm0})^2}{2(\Delta\omega_D)^2}}, \quad \sigma_0 = \sigma(\omega = \omega_{nm0}) = \frac{\lambda_{nm0}^2}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\Delta\omega_D \tau}. \quad (26.33)$$

Цей результат легко пояснити на основі якісного аналізу. У випадку неоднорідного уширення з полем буде взаємодіяти тільки та група атомів, для яких частота поля лежить у межах спектрального інтервалу, приблизно рівному однорідній ширині  $\Gamma_0$ . Відносна кількість таких атомів дорівнює  $\Gamma_0 / \Delta\omega_D = 1 / \Delta\omega_D \tau \ll 1$ . Очевидно, що резонансний переріз взаємодії, для якого у випадку нерухомого атома буде  $\Gamma_0 \tau = 1$ , треба помножити на величину  $1 / \Delta\omega_D \tau$ , що в підсумку приводить до (26.32).

Вплив неоднорідного уширення може бути як більшим, так і меншим від однорідного. У випадку, коли однорідне та неоднорідне уширення співрозмірні, вираз для ймовірності переходу знаходимо в результаті згортки лоренцового та гауссового розподілів:

$$P_{nm} = I_0 \frac{\lambda_{nm0}^2}{2\pi} \frac{1}{\Gamma_0 \tau} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta\omega_D} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(\omega_{nm} - \omega_{nm0})^2}{2(\Delta\omega_D)^2}} \frac{1}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_{nm}}{\Gamma_0/2}\right)^2} d\omega_{nm}. \quad (26.34)$$

#### Контрольні запитання

1. Яка причина спонтанного розпаду атома у вільному просторі?
2. Які існують типи уширення резонансної лінії?
3. Як впливає процес спонтанного розпаду на ймовірність вимушених переходів?

**Література:** [6], § 35.

**Додаткова література:** [VI].

## Розділ IX

### ОСНОВИ ТЕОРІЇ РОЗСІЮВАННЯ

#### § 27. Основи теорії розсіювання при взаємодії частинок

##### 27.1. Постановка задачі про зіткнення частинок

Аналіз процесів зіткнення частинок є однією з важливих задач квантової механіки. При зіткненні відбувається перехід від початкового стану, який називають *вхідним каналом*, до кінцевого (тобто сукупності *вихідних каналів* процесу розсіювання, яким відповідають різні кінцеві продукти). Процес розсіювання може характеризуватися *пружним* і *непружним* каналами. При пружному розсіюванні кінцеві продукти збігаються з початковими частинками. В умовах будь-якого реального (не модельного) експерименту в процесі пружного розсіювання беруть участь дві частинки. Ймовірність одночасної взаємодії трьох або більшої кількості частинок дуже мала.

Процес розсіювання зручно розглядати в системі центра мас. Для цього необхідно ввести дві координати, одна з яких щоб відповідала положенню центра мас  $\vec{R}$ , а інша – відносній координаті  $\vec{r}$  (8.2):

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \quad (27.1)$$

У цій системі процес розсіювання відповідає відносному руху однієї фіктивної частинки з приведеною масою

$$\tilde{\mu} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (27.2)$$

у розсіювальному потенціалі  $V(\vec{r})$ .

Задача про розсіювання характеризується тим, що початковий і кінцевий стани цієї фіктивної частинки характеризуються її вільним рухом, а сам процес розсіювання триває обмежений час і відбувається в обмеженій області. Падаюча частинка (або система ідентичних падаючих частинок) описується плоскою хвилею

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = A e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}, \quad A = 1/\sqrt{V}, \quad \text{де } V - \text{об'єм квантування.} \quad (27.3)$$

Цій частинці відповідає густина струму ймовірності (6.14):

$$\vec{j}_{\text{пад}} = \frac{i\hbar}{2\mu} \{ \Psi_{\vec{p}} \nabla \Psi_{\vec{p}}^* - \Psi_{\vec{p}}^* \nabla \Psi_{\vec{p}} \} = \vec{v} |A|^2. \quad (27.4)$$

Характеристики процесу пружного розсіювання задаються початковим  $\vec{p} = \{0, 0, p\}$  і кінцевим  $\vec{p}'$  імпульсами фіктивної частинки, причому  $|\vec{p}| = |\vec{p}'|$ .

Розсіяна хвиля на великій відстані від області розсіювання має вигляд розбіжної сферичної хвилі

$$\Psi_{\vec{p}'}(\vec{r})_{r \rightarrow \infty} = A f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{p}'\vec{r}/\hbar}}{r} = A f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{p}r/\hbar}}{r}, \quad (27.5)$$

яка рухається в радіальному напрямку від області розсіювання і характеризується густиною струму ймовірності

$$\begin{aligned} \vec{j}_{\text{розс}} &= \frac{i\hbar}{2\mu} \{ \Psi_{\vec{p}'} \nabla \Psi_{\vec{p}'}^* - \Psi_{\vec{p}'}^* \nabla \Psi_{\vec{p}'} \} = \vec{v}' |A|^2 \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} = \\ &= \vec{e}_r v |A|^2 \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2}. \end{aligned} \quad (27.6)$$

Комплексна величина  $f(\theta, \varphi)$  має розмірність координати й називається *амплітудою* або *довжиною розсіювання*. Виходячи з такої постановки задачі, стає очевидним, що стаціонарне рівняння Шредінгера необхідно розв'язувати при асимптотичному вигляді хвильової функції

$$\Psi(\vec{r})_{r \rightarrow \infty} = A \left( e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{p}r/\hbar}}{r} \right). \quad (27.7)$$

Основна задача теорії розсіювання полягає в обчисленні потоку розсіяних частинок на великій відстані від області взаємодії. Цей процес легко виразити через кількість частинок  $\Delta N_{\text{розс}}$ , розсіяних у напрямку малого тілесного кута  $\Delta\Omega \ll 4\pi$ :

$$\Delta N_{\text{розс}} = \vec{j}_{\text{пад}} | \Delta\Omega \sigma(\theta, \varphi). \quad (27.8)$$

Коефіцієнт пропорційності  $\sigma(\theta, \varphi)$  має розмірність площі й називається *диференціальним перерізом розсіювання*. Величину  $\Delta N_{\text{розс}}$  можна визначити, виходячи з густини струму ймовірності (27.6) для розсіяних частинок:

$$\Delta N_{\text{розс}} = \vec{j}_{\text{розс}} | r^2 \Delta\Omega = \vec{j}_{\text{пад}} | \Delta\Omega | f(\theta, \varphi) |^2. \quad (27.9)$$

Порівняння (27.8) і (27.9) приводить до встановлення зв'язку між диференціальним перерізом розсіювання та амплітудою (довжиною) розсіювання

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2. \quad (27.10)$$

Іншою важливою характеристикою процесу розсіювання є *повний переріз розсіювання*

$$\sigma = \int_{4\pi} \sigma(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (27.11)$$

який пов'язаний з диференціальним перерізом розсіювання співвідношенням

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (27.12)$$

Повний переріз розсіювання розглядався під час аналізу процесів взаємодії заряджених частинок з атомами та при взаємодії електромагнітного випромінювання з квантовими системами.

## 27.2. Борнівське наближення в теорії розсіювання

Існують різні методи визначення амплітуди розсіювання та відповідних перерізів. Одним із найбільш простих, але водночас дуже ефективних, є так зване *борнівське наближення*, яке аналогічне стаціонарній теорії збурень. Розглянемо його.

Запишемо рівняння Шредінгера у вигляді

$$(\Delta + k^2)\Psi_p(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\Psi_p(\vec{r}), \quad k^2 = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad (27.13)$$

який відповідає неоднорідному рівнянню. Розв'язок цього неоднорідного рівняння (27.13) можна записати, використовуючи функцію Гріна  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  однорідного рівняння

$$\Psi_p(\vec{r}) = \Delta\Psi_p(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r}')\Psi_p(\vec{r}')dV', \quad (27.14)$$

де  $\Delta\Psi_p(\vec{r})$  – загальний розв'язок однорідного рівняння (лівої частини (27.13)). У загальному випадку функція Гріна є розв'язком рівняння

$$(\Delta + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (27.15)$$

Покажемо, що асимптотична умова (27.7) буде виконаною, якщо загальний розв'язок  $\Delta\Psi_p(\vec{r})$  відповідає хвильовій функції падаючої частинки (27.3)

$$\Delta\Psi_p(\vec{r}) = Ae^{i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} = Ae^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (27.16)$$

а функція Гріна має вигляд сферичної розбіжної хвилі

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{A}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}. \quad (27.17)$$

Це твердження можна довести, якщо врахувати, що в асимптотичній області  $r \rightarrow \infty$  вираз для функції Гріна, яка входить до складу підінтегрального члена в (27.14), можна розкласти за малою величиною  $|r'/r| \ll 1$ , поклавши  $|\vec{r}-\vec{r}'| \approx r - \vec{r}\vec{r}'/r$ :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') \approx -\frac{A}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}'}, \quad \vec{k}' = k\vec{r}/r. \quad (27.18)$$

Підставляючи цей вираз у (27.14), маємо

$$\Psi_p(\vec{r})_{r \rightarrow \infty} = Ae^{i\vec{k}\vec{r}} - A \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} V(\vec{r}')\Psi_p(\vec{r}')dV'. \quad (27.19)$$

Порівнюючи цей результат з (27.7), знаходимо загальний вираз для амплітуди розсіювання

$$f(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}'\vec{r}'} V(\vec{r}')\Psi_p(\vec{r}')dV'. \quad (27.20)$$

Використовуючи цю формулу, легко знайти вираз для  $f(\theta)$  у випадку, коли амплітуда розсіяної хвилі мала (цьому відповідає, напр., мала величина розсіювального потенціалу  $V(r)$ ) і можна використати теорію збурень.

Будемо шукати розв'язок рівняння (27.13) у вигляді двох перших членів ряду теорії збурень

$$\Psi_p(\vec{r}) \approx \Psi_p^{(0)}(\vec{r}) + \beta\Psi_p^{(1)}(\vec{r}), \quad \beta \sim \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r). \quad (27.21)$$

Підставляючи (27.21) у (27.13), отримаємо два рівняння

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2)\Psi_p^{(0)}(\vec{r}) &= 0, \\ (\Delta + k^2)\Psi_p^{(1)}(\vec{r}) &= \Psi_p^{(0)}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (27.22)$$

Розв'язок першого рівняння цієї системи відповідає хвильовій функції падаючої частинки (27.3)

$$\Psi_p^{(0)}(\vec{r}) = \Delta\Psi_p(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (27.23)$$

а амплітуда розсіювання (27.20) у нульовому наближенні має вигляд

$$f(\theta) \approx f^{(0)}(\theta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\vec{r}'} V(\vec{r}')dV', \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}. \quad (27.24)$$

Із (27.24) видно, що амплітуда розсіювання в нульовому порядку пропорційна фур'є-розкладу розсіювального потенціалу для переданого в процесі розсіювання імпульсу

$$\hbar\vec{q} = 2p \sin(\theta/2) \frac{\vec{q}}{q}. \quad (27.25)$$

Вираз (27.24) отримав М. Борн, тому і метод його визначення на основі першого порядку теорії збурень називають *борнівським наближенням* у теорії розсіювання. У випадку дуже малого імпульсу

(і малої енергії) частинки  $\bar{q} \sim p \rightarrow 0$  вираз (27.24) не буде залежати від кута розсіювання

$$f(\theta)_{p \rightarrow 0} = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int V(\bar{r}') dV'. \quad (27.26)$$

Така умова відповідає ізотропному розсіюванню.

Слід зауважити, що застосування граничного випадку  $\bar{q} \sim p \rightarrow 0$  вимагає окремого дослідження. У загальному випадку застосування борнівського наближення обмежене умовою, що потенціальна енергія є збуренням, яке застосовується за малої величини розсіювального потенціалу або великої кінетичної енергії частинки.

Наприклад, для кулонівського потенціалу  $V(r) = Ze^2/r$  амплітуда розкладу Фур'є має вигляд

$$V(q) = \int e^{-i\bar{q}\bar{r}'} V(\bar{r}') dV' = \frac{4\pi Ze^2}{q^2}. \quad (27.27)$$

Їй відповідає амплітуда розсіювання

$$f(\theta) = -\frac{2\mu Ze^2}{q^2 \hbar^2} \quad (27.28)$$

і диференційний переріз розсіювання

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{\mu Ze^2}{2\hbar^2 k^2 \sin^2(\theta/2)} \right|^2 = \left| \frac{Ze^2}{4E} \right|^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (27.29)$$

який збігається із формулою Резерфорда, отриманою методами класичної фізики, де  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$  – кінетична енергія частинки. За дуже малих кутів розсіювання ця формула буде некоректною.

Аналогічно можна обчислити амплітуду та ефективний переріз розсіювання частинки із зарядом  $Q$  на атомі, у якому потенціальна енергія визначається виразом

$$V(\bar{r}) = Q\phi(\bar{r}), \quad \Delta\phi(\bar{r}) = -4\pi(Ze\delta(\bar{r}) - en(\bar{r})) \quad (27.30)$$

і залежить від потенціалу атома  $\phi(\bar{r})$ , що визначається з рівняння Пуассона, та густини розподілу електронів  $n(\bar{r})$ . Амплітуда фур'є-розкладу для енергії (27.30) має вигляд

$$V(q) = \int e^{-i\bar{q}\bar{r}'} V(\bar{r}') dV' = \frac{4\pi eQ}{q^2} \{Z - n(q)\}, \quad n(q) = \int e^{-i\bar{q}\bar{r}'} n(\bar{r}') dV' \quad (27.31)$$

і залежить від фур'є-образу розподілу електронів у атомі. Цим величинам відповідає амплітуда розсіювання

$$f(\theta) = -\frac{2\mu eQ}{\hbar^2 q^2} \{Z - n(q)\} \quad (27.32)$$

і диференційний переріз розсіювання

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{2\mu eQ}{\hbar^2 q^2} \{Z - n(q)\} \right|^2. \quad (27.33)$$

За малого імпульсу  $|\bar{q}\bar{r}'| \ll 1$  вираз для фур'є-образу розподілу електронів набуває вигляду

$$n(q) = \int \left( 1 - i\bar{q}\bar{r}' - \frac{(\bar{q}\bar{r}')^2}{2} \right) n(\bar{r}') dV' = Z - \frac{q^2}{6} \langle r^2 \rangle, \quad (27.34)$$

$$\langle r^2 \rangle = \int (r')^2 n(\bar{r}') dV'.$$

У цьому наближенні амплітуда розсіювання та диференційний переріз

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{\mu eQ}{3\hbar^2} \right|^2 \quad (27.35)$$

не залежать від кута розсіювання, тому розрахунок справедливий при довільному куті розсіювання.

За великого переданого імпульсу експонента в підінтегральному виразі (27.31) є швидкоосцилюючою функцією і

$$n(q) = \int e^{-i\bar{q}\bar{r}'} n(\bar{r}') dV' \approx 0. \quad (27.36)$$

У цьому випадку з (27.32) і (27.33) отримуємо

$$f(\theta) = -\frac{2\mu ZeQ}{\hbar^2 q^2}, \quad (27.37)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \left| \frac{2\mu ZeQ}{\hbar^2 q^2} \right|^2 = \left| \frac{ZQe}{4E} \right|^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}, \quad (27.38)$$

що відповідає розсіянню Резерфорда.

**Контрольні запитання**

1. Яка величина називається амплітудою розсіювання?
2. Чому за малої енергії амплітуда розсіювання не залежить від кута розсіювання?
3. Який метод у теорії розсіювання називається борнівським?

**Література:** [2], § 81–82.

## Розділ X

### МЕТОД МАТРИЦІ ГУСТИНИ ТА ЙОГО ВИКОРИСТАННЯ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

#### § 28. Метод матриці густини у квантовій механіці

##### 28.1. Чисті та змішані стани квантової системи.

##### Матриця густини

Усі закони, які характеризують явища мікросвіту, базуються на їх імовірнісному описі. У квантовій механіці ймовірність є основою побудови теорії. Для розв'язання задач квантової механіки необхідно знайти розв'язки відповідних рівнянь на власні значення та власні функції

$$\hat{A}\Psi_n(q) = A_n\Psi_n(q) \quad (28.1)$$

або розв'язати нестационарне рівняння Шредінгера, причому відповідні хвильові функції  $\Psi_n(q)$  мають зміст амплітуд імовірності. Виходячи з повноти та ортогональності системи функцій  $\Psi_n(q)$ , хвильову функцію всієї системи можна описати виразом

$$\Psi(q,t) = \sum_n c_n(t)\Psi_n(q). \quad (28.2)$$

Апріорі вважається, що хвильова функція, якщо її навіть не вдається знайти в аналітичному вигляді, існує й максимально повно опи-

сує стани конкретної системи. Слід зауважити, що таке безпосереднє трактування методу опису станів системи за допомогою хвильової функції не є універсальним. Стан квантової системи, який описується хвильовою функцією, називається *чистим станом*. Він відповідає максимально повним відомостям про квантову систему.

Для чистих станів легко знайти середнє значення фізичної величини в системі, яка описується функцією (28.2):

$$\langle F(t) \rangle = \int \Psi^*(q, t) \hat{F}(q, t) \Psi(q, t) dq = \sum_{n, m} c_n^*(t) F_{nm} c_m(t), \quad (28.3)$$

$$F_{nm} = \int \Psi_n^*(q) \hat{F}(q, t) \Psi_m(q) dq.$$

Можна ввести допоміжну матрицю

$$\rho_{mn} = c_n^* c_m, \quad (28.4)$$

за допомогою якої легко проводити процедуру усереднення (28.3):

$$\langle F(t) \rangle = \sum_{n, m} \rho_{mn} F_{nm} = \sum_m (\hat{\rho} \hat{F})_{mm} = \sum_n (\hat{F} \hat{\rho})_{nn} \equiv \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{F}). \quad (28.5)$$

Матриця  $\rho_{mn}$  є *матрицею густини для чистих станів*.

У квантовій системі існують і такі стани, яким неможливо зіставити ніякі хвильові функції. Прикладом таких станів можуть бути такі, що задаються набором чисел  $|c_n|^2$ , тобто ймовірностями станів з певними значеннями відповідних фізичних величин  $A$ . У цьому випадку неможливо побудувати функції  $\Psi(q, t)$  за типом (28.2), оскільки наявність  $|c_n|^2$  не дає фазових співвідношень між різними власними функціями  $\Psi_n(q)$ . У даному випадку маємо суміш (не суперпозицію) різних станів з невизначеними фазовими співвідношеннями. Фази окремих станів можуть змінюватися неконтрольовано за рахунок взаємодії з іншими системами, що символічно можна зобразити у вигляді двох об'єктів, один з яких є *динамічною підсистемою*  $A$ , яку можна описати оператором Гамільтона  $\hat{H}_A(q_A)$ .

Динамічна підсистема взаємодіє з іншою системою  $B$ , яка має значно більше ступенів свободи і характеризується набагато більшою теплоємністю, ніж система  $A$ . Її назвемо *термостатом*. Оператором Гамільтона термостата є  $\hat{H}_B(q_B)$ . Взаємодія динамічної підсистеми й термостата описується оператором  $\hat{H}_{AB}(q_A, q_B)$ . Будь-які зміни динамічної системи не впливають на стан термостата, який завжди перебуває в рівноважному стані, що символічно зображено на рис. 28.1.

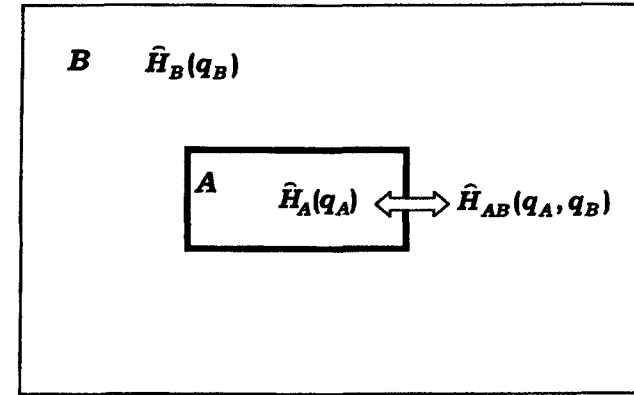


Рис. 28.1. Символічне зображення динамічної підсистеми та термостата

Припустимо, що нас цікавить оператор  $\hat{F}_A(q, t)$ , який діє в межах динамічної підсистеми. Якби між динамічною підсистемою та термостатом не було взаємодії, то оператору Гамільтона всієї системи  $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$  відповідала б функція  $\Psi(q_A, q_B, t) = \Psi(q_A, t) \Psi(q_B, t)$ . У цьому випадку середнє значення величини  $F_A(q, t)$ :

$$\begin{aligned} \langle F_A(t) \rangle &= \int \Psi^*(q_A, t) \hat{F}_A(q_A, t) \Psi(q_A, t) dq_A \int \Psi^*(q_B, t) \Psi(q_B, t) dq_B = \\ &= \int \Psi^*(q_A, t) \hat{F}_A(q_A, t) \Psi(q_A, t) dq_A \end{aligned} \quad (28.6)$$

можна знайти за допомогою власних функцій динамічної підсистеми. За наявності взаємодії  $\hat{H}_{AB}(q_A, q_B)$  таке розділення хвильової функції  $\Psi(q_A, q_B, t)$  неможливе, а сама динамічна підсистема є змішаною, її неможливо описати власною функцією, незалежною від термостата. Стани, які неможливо ототожнити із хвильовою функцією, називають *змішаними*. Для опису таких станів необхідно використати інший метод – *метод матриці густини*, який уперше запропонував Дж. фон Нейман у 1927 р.

Розглянемо оператори  $\hat{K}_A(q_A, t)$  та  $\hat{K}_B(q_B, t)$ , кожний з яких діє тільки у відповідній системі. Кожний із цих операторів має набір власних функцій

$$\begin{aligned} \hat{K}_A(q_A) \varphi_n(q_A) &= K_n \varphi_n(q_A), \\ \hat{K}_B(q_B) \varphi_\alpha(q_B) &= K_\alpha \varphi_\alpha(q_B), \end{aligned} \quad (28.7)$$



добуток яких  $\varphi_n(q_A)\varphi_\alpha(q_B)$  утворює повний і взаємно ортогональний набір

$$\iint \varphi_n^*(q_A)\varphi_\alpha^*(q_B)\varphi_m(q_A)\varphi_\beta(q_B)dq_A dq_B = \delta_{nm}\delta_{\alpha\beta}. \quad (28.8)$$

Розкладемо хвильову функцію  $\Psi(q_A, q_B, t)$  за цим добутком:

$$\Psi(q_A, q_B, t) = \sum_{n,\alpha} c_{n\alpha}(t)\varphi_n(q_A)\varphi_\alpha(q_B). \quad (28.9)$$

Якщо коефіцієнти розкладу можна представити у вигляді  $c_{n\alpha}(t) = c_n(t)c_\alpha(t)$ , то це відповідає чистому стану. Якщо таке розділення неможливе, то стан є змішаним. Використовуючи (28.8) і (28.9), можна знайти середнє значення оператора  $\hat{F}_A(q, t)$ :

$$\begin{aligned} \langle F_A(t) \rangle &= \sum_{nm} \sum_{\alpha\beta} c_{n\alpha}^*(t)c_{m\beta}(t) \int \varphi_n^*(q_A)\hat{F}_A(q_A, t)\varphi_m(q_A)dq_A \int \varphi_\alpha^*(q_B)\varphi_\beta(q_B)dq_B = \\ &= \sum_{nm} \sum_{\alpha\beta} c_{n\alpha}^*(t)c_{m\beta}(t)F_{nm}(t)\delta_{\alpha\beta} = \sum_{nm} \sum_{\alpha} c_{n\alpha}^*(t)c_{m\alpha}(t)F_{nm}(t), \\ F_{nm} &= \int \varphi_n^*(q_A)\hat{F}_A(q_A, t)\varphi_m(q_A)dq_A. \end{aligned} \quad (28.10)$$

Цей вираз можна записати більш компактно, якщо ввести матрицю густини для змішаного стану

$$\begin{aligned} \langle F_A(t) \rangle &= \sum_{nm} \rho_{mn} F_{nm} = \sum_m (\hat{\rho}\hat{F})_{mm} = \sum_n (\hat{F}\hat{\rho})_{nn}, \\ \rho_{mn}(t) &= \sum_{\alpha} c_{n\alpha}^*(t)c_{m\alpha}(t). \end{aligned} \quad (28.11)$$

Формально задачу розв'язано, оскільки за допомогою матриці густини (28.10) для змішаного стану можна обчислювати величини, які відповідають динамічній підсистемі. Проте ця простота є удаваною, тому що для визначення цієї матриці нам необхідно знати хвильову функцію (28.9) усієї системи, включаючи термостат, що в багатьох випадках є неможливим (поняття термостата, як глобальної системи, яка взаємодіє з динамічною підсистемою можна розширити на весь Всесвіт). Розглянемо цей випадок з іншого погляду, використовуючи ту обставину, що термостат – це система з великою теплоємністю, яка завжди перебуває в стані рівноваги.

Припустимо, що термостат перебуває у стані  $\alpha$ . Хвильова функція динамічної підсистеми опосередковано залежить від стану термостата, але її завжди можна представити у вигляді розкладу за власними функціями оператора  $\hat{K}_A(q_A, t)$ :

$$\Psi(q_A, \alpha, t) = \sum_n c_n(\alpha, t)\varphi_n(q_A), \quad (28.12)$$

який діє тільки в динамічній підсистемі й має набір власних функцій  $\varphi_n(q_A)$  (28.7). Використовуючи (28.12), знайдемо умовне середнє значення оператора  $\hat{F}_A(q, t)$ :

$$\begin{aligned} \langle F_A(\alpha, t) \rangle &= \int \Psi^*(q_A, \alpha, t)\hat{F}_A(q_A, t)\Psi(q_A, \alpha, t)dq_A = \\ &= \sum_{nm} c_n^*(\alpha, t)c_m(\alpha, t)F_{nm}, \quad \text{де } F_{nm} = \int \varphi_n^*(q_A)\hat{F}_A(q_A, t)\varphi_m(q_A)dq_A. \end{aligned} \quad (28.13)$$

Остаточний вираз для середнього значення величини  $\hat{F}_A(q, t)$  знаходимо при усередненні умовного середнього (28.13) за всіма можливими значеннями стану термостата  $\alpha$  за допомогою густини ймовірності  $w(\alpha)$  реалізації конкретного стану термостата

$$\begin{aligned} \langle F_A(t) \rangle &= \langle \langle F_A(\alpha, t) \rangle \rangle_{\alpha} = \sum_{\alpha} w(\alpha) \sum_{nm} c_n^*(\alpha, t)c_m(\alpha, t)F_{nm} = \\ &= \sum_{nm} \left\{ \sum_{\alpha} w(\alpha)c_n^*(\alpha, t)c_m(\alpha, t) \right\} F_{nm}. \end{aligned} \quad (28.14)$$

Співвідношення (28.11) і (28.14) визначають двома методами одну й ту саму величину  $\langle F_A(t) \rangle$ . Порівнюючи ці вирази, знаходимо остаточний вираз для матриці густини змішаного стану динамічної підсистеми

$$\rho_{mn}(t) = \sum_{\alpha} w(\alpha)c_n^*(\alpha, t)c_m(\alpha, t). \quad (28.14)$$

Очевидно, що для чистого стану густина ймовірності має вигляд

$$w(\alpha) = \delta_{\alpha\alpha_0}. \quad (28.15)$$

Визначимо основні властивості матриці густини для змішаного стану:

$$1) \text{ діагональні елементи матриці густини } \rho_{nn}(t) = \sum_{\alpha} w(\alpha)|c_n(\alpha, t)|^2$$

мають зміст імовірностей заселення конкретних станів динамічної підсистеми, усереднених за можливим станом термостата, унаслідок чого вони є додатними та нормованими

$$\sum_n \rho_{nn}(t) = \text{Sp}\hat{\rho} = 1, \rho_{nn}(t) \geq 0; \quad (28.16)$$

2) з очевидного перетворення

$$\begin{aligned} \rho_{mn}(t) &= \sum_{\alpha} w(\alpha) c_n^*(\alpha, t) c_m(\alpha, t) = \\ &= \sum_{\alpha} w(\alpha) (c_n(\alpha, t) c_m^*(\alpha, t))^* = \sum_{\alpha} w(\alpha) (c_m^*(\alpha, t) c_n(\alpha, t))^* = \rho_{nm}^*(t) \end{aligned} \quad (28.17)$$

випливає, що матриця густини є самоспряженою;

3) матриця густини задовольняє умову

$$Sp\hat{\rho}^2 \leq Sp\hat{\rho} \equiv 1, \quad (28.18)$$

причому рівність  $Sp\hat{\rho}^2 = Sp\hat{\rho}$  відповідає чистому стану. Доведення умови (28.18) випливає з таких перетворень:

$$\begin{aligned} Sp\hat{\rho}^2 &= \sum_n (\hat{\rho}\hat{\rho})_{nn} = \sum_{nm} \rho_{nm} \rho_{mn} = \\ &= \sum_{nm} \sum_{\alpha} (w(\alpha) c_m^*(\alpha) c_n(\alpha)) \sum_{\beta} (w(\beta) c_n^*(\beta) c_m(\beta)) = \\ &= \sum_{\alpha} w(\alpha) \sum_{\beta} w(\beta) \sum_n c_n^*(\beta) c_n(\alpha) \sum_m c_m^*(\alpha) c_m(\beta). \end{aligned} \quad (28.18)$$

Враховуючи, що

$$\begin{aligned} \sum_n c_n^*(\beta) c_n(\alpha) &\leq \sum_n c_n^*(\alpha) c_n(\alpha) \equiv 1, \\ \sum_n c_m^*(\alpha) c_m(\beta) &\leq \sum_m c_m^*(\alpha) c_m(\alpha) \equiv 1, \end{aligned} \quad (28.19)$$

із (28.18) отримуємо умову (28.18):

$$Sp\hat{\rho}^2 \leq \sum_{\alpha} w(\alpha) \sum_{\beta} w(\beta) = 1. \quad (28.20)$$

## 28.2. Рівняння руху для матриці густини

Матриця густини є статистичним оператором. Знайдемо рівняння руху для  $\rho_{mn}(t)$ . Його можна знайти тільки за умови, якщо термостат є стаціонарною системою з дуже великою теплоємністю та дуже малим часом внутрішньої релаксації. Звідси випливає, що на термостат не впливають зміни, які відбуваються в динамічній підсистемі. В узагальнюючій формі цю властивість можна виразити умовою

$$\frac{\partial w(\alpha)}{\partial t} = 0. \quad (28.21)$$

Рівняння Шредингера для динамічної підсистеми за умови, що термостат перебуває у стані  $\alpha$ , має вигляд

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(q_A, \alpha, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(q_A, \alpha, t), \quad \hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_{AB}, \quad \hat{H}_{AB} = \hat{H}^{relax} + \hat{V}. \quad (28.22)$$

У (28.22) враховано, що оператор  $\hat{H}_{AB}$ , який визначає взаємодію динамічної підсистеми з термостатом, містить як оператор  $\hat{H}^{relax}$ , дія якого приводить до релаксації динамічної системи до стану, рівноважного з термостатом, так і оператор  $\hat{V}$ , який характеризує можливі нерелаксаційні процеси зовнішнього впливу на динамічну підсистему (напр., дію зовнішнього електромагнітного поля  $\hat{V}$  на атом  $\hat{A}$ , який взаємодіє з оточенням  $\hat{B}$ ). Звичайно, поділ оператора  $\hat{H}_{AB}$  на дві частини досить умовний і буде неодноковим для різних задач, але корисним, якщо треба детально визначити вплив спеціального збурення на динамічну підсистему.

Розв'язок рівняння (28.22) можна розкласти за власними функціями  $\varphi_n(q_A)$  (28.7) оператора  $\hat{K}_A(q_A, t)$ , що діє в межах динамічної підсистеми

$$\Psi(q_A, \alpha, t) = \sum_n c_n(\alpha, t) \varphi_n(q_A). \quad (28.23)$$

Підставляючи (28.23) у (28.22), знайдемо рівняння Шредингера в енергетичному представленні (інша назва – рівняння руху для амплітуд  $c_n(\alpha, t)$ ):

$$i\hbar \frac{\partial c_n(\alpha, t)}{\partial t} = \sum_k H_{nk} c_k(\alpha, t). \quad (28.24)$$

Для визначення рівняння руху для  $\rho_{mn}(t)$  знайдемо частинну похідну від (28.14):

$$\frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} = \sum_{\alpha} w(\alpha) \left( \frac{\partial c_m^*(\alpha, t)}{\partial t} c_n(\alpha, t) + c_m^*(\alpha, t) \frac{\partial c_n(\alpha, t)}{\partial t} \right). \quad (28.25)$$

Із (28.24) можна знайти вирази для відповідних похідних

$$\frac{\partial c_m^*(\alpha, t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_k H_{mk}^* c_k^*(\alpha, t) = -\frac{1}{i\hbar} \sum_k H_{km} c_k^*(\alpha, t),$$

$$\frac{\partial c_n(\alpha, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k H_{nk} c_k(\alpha, t).$$

Підставляючи ці похідні в (28.25), знаходимо рівняння руху (рівняння Неймана):

$$\frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \sum_k (H_{mk} \rho_{kn} - \rho_{mk} H_{kn}) = \frac{1}{i\hbar} \sum_k [\hat{H}\hat{\rho}]_{mn}. \quad (28.26)$$

Його можна привести до більш зручного вигляду, якщо як довільний оператор  $\hat{K}_A(q_A, t)$ , який діє в межах динамічної підсистеми та використовується для визначення власних функцій  $\varphi_n(q_A)$  (28.7) задіяти оператор Гамільтона  $\hat{H}_A$  динамічної підсистеми. У цьому випадку розклад (28.23) відповідає переходу у власне представлення оператора  $\hat{H}_A$ . Для такого представлення матричні елементи оператора  $\hat{H}_A$  мають діагональний вигляд

$$(H_A)_{nm} = E_n \delta_{nm}, \quad (28.27)$$

а рівняння руху (28.26) після деяких перетворень

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_k \{ E_k \delta_{mk} \rho_{kn} + (H_{mk}^{relax} + V_{mk}) \rho_{kn} - \rho_{mk} E_k \delta_{nk} H_{kn} - \rho_{mk} (H_{kn}^{relax} + V_{kn}) \} = \\ &= -i \frac{E_m - E_n}{\hbar} \rho_{mn} + \frac{1}{i\hbar} \sum_k \{ (H_{mk}^{relax} + V_{mk}) \rho_{kn} - \rho_{mk} (H_{kn}^{relax} + V_{kn}) \} \end{aligned}$$

набуває остаточного вигляду

$$\frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} = -i \omega_{mn} \rho_{mn} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}^{relax} \hat{\rho}]_{mn} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{V} \hat{\rho}]_{mn}. \quad (28.28)$$

Це рівняння є основою для обчислення  $\rho_{mn}$  у різних системах. Його детальний аналіз проведемо далі.

#### Контрольні запитання

1. Яка система відповідає задачі про рух електрона в полі центральної сили (задача про атом водню), чиста чи змішана?
2. Який зміст мають діагональні елементи матриці густини?
3. За якими ознаками можна розрізнити чисту та змішану системи?

**Література:** [4], § 14; [7], гл.3.

**Додаткова література:** [1].

## § 29. Релаксація матриці густини.

### Самоузгоджена система

#### для електромагнітного поля та речовини в наближенні матриці густини

#### 29.1. Релаксація матричних елементів матриці густини

Для визначення явного вигляду матриці густини необхідно розв'язати рівняння (28.28). Спочатку визначимо явний вигляд релаксаційного члена  $[\hat{H}^{relax} \hat{\rho}]_{mk}$ . Процес релаксації зазвичай не залежить від детермінованого нерелаксаційного зовнішнього впливу  $\hat{V}$ , тому для спрощення аналізу покладемо  $\hat{V} = 0$ . Розглянемо вигляд релаксаційного члена окремо для діагональних і недиагональних матричних елементів.

**29.1.1. Релаксація діагональних матричних елементів.** Рівняння руху для діагональних матричних елементів має вигляд

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}^{relax} \hat{\rho}]_{nn} \quad (29.1)$$

і визначає зміну нормованих імовірностей  $\rho_{nn}(t)$  перебування системи в різних станах динамічної підсистеми (рівноцінна інтерпретація – зміна нормованих імовірностей заселення або *заселеностей* різних станів) у результаті дії термостата. Виходячи з такого розуміння  $\rho_{nn}(t)$ , можна провести альтернативний аналіз тієї самої задачі про зміну ймовірностей заселення за наявності феноменологічних імовірностей релаксаційних переходів  $w_{nk}$  між різними рівнями на основі кінетичного рівняння

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = \sum_{k \neq n} (\rho_{kk}(t) w_{kn} - \rho_{nn}(t) w_{nk}). \quad (29.2)$$

Імовірності релаксаційних переходів не залежать від часу внаслідок дуже великої теплоємності термостата та дуже малого часу релаксації в межах термостата.

Для стану термодинамічної рівноваги ймовірність заселення будь-якого рівня не залежить від часу і характеризується *рівноважним розподілом Больцмана*  $\rho_{nn}^0$ :

$$\frac{\partial \rho_{nn}^0}{\partial t} = 0, \quad \rho_{nn}^0 = \frac{e^{-E_n/k_B T}}{\sum_k e^{-E_k/k_B T}}. \quad (29.3)$$

У стані термодинамічної рівноваги рівняння (29.2) набуває вигляду

$$\frac{\partial \rho_{nn}^0}{\partial t} = \sum_{k \neq n} (\rho_{kk}^0 w_{kn} - \rho_{nn}^0 w_{nk}) = 0. \quad (29.4)$$

Це рівняння виконується тоді, коли стан рівноваги виконується між кожною парою рівнів

$$\rho_{kk}^0 w_{kn} - \rho_{nn}^0 w_{nk} = 0. \quad (29.5)$$

Звідси знаходимо зв'язок між ймовірностями релаксаційних переходів у зворотних напрямках

$$\frac{w_{kn}}{w_{nk}} = \frac{\rho_{nn}^0}{\rho_{kk}^0} = e^{-\frac{E_n - E_k}{k_B T}}. \quad (29.6)$$

Введемо час релаксації для кожного конкретного переходу

$$T_{kn} = \frac{\rho_{nn}^0}{w_{kn}}. \quad (29.7)$$

Унаслідок умови (29.5) маємо

$$T_{kn} = T_{nk}. \quad (29.8)$$

Величину  $T_{kn}$  називають *повздовжнім часом релаксації*. Його зміст з'ясуємо далі.

Використовуючи означення (29.7), перепишемо рівняння (29.4) в альтернативній формі

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = \sum_{k \neq n} \left\{ \frac{1}{T_{nk}} (\rho_{kk}(t) \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \rho_{kk}^0) \right\}. \quad (29.9)$$

У тому випадку, коли  $T_{nk}$  не залежить від  $n$  і  $k$ , можна позначити  $T_{nk} = T_1$  і переписати (29.9) у вигляді

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = \frac{1}{T_1} \left\{ \rho_{nn}^0 \sum_{k \neq n} \rho_{kk}(t) - \rho_{nn}(t) \sum_{k \neq n} \rho_{kk}^0 \right\} = \frac{1}{T_1} \{ \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \}. \quad (29.10)$$

Розв'язок цього рівняння має вигляд

$$\rho_{nn}(t) = \rho_{nn}(0) e^{-\frac{t}{T_1}} + \rho_{nn}^0 (1 - e^{-\frac{t}{T_1}}). \quad (29.11)$$

Із (29.11) видно, що час повздовжньої релаксації визначає тривалість релаксації початкової нерівноважної заселеності конкретного рівня  $\rho_{nn}(0)$  до рівноважного значення  $\rho_{nn}^0$ .

Прирівнюючи ліві частини рівнянь (29.1), (29.9) та (29.10), знаходимо альтернативні вирази для релаксаційного члена, що характеризує релаксацію діагональних матричних елементів:

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}^{relax} \hat{\rho}]_{nn} = \sum_{k \neq n} \left\{ \frac{1}{T_{nk}} (\rho_{kk}(t) \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \rho_{kk}^0) \right\}, \quad (29.12, a)$$

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}^{relax} \hat{\rho}]_{nn} = \frac{1}{T_1} \{ \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \}, \quad (29.12, б)$$

а також вигляд рівнянь для визначення діагональних матричних елементів

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{V} \hat{\rho}]_{nn} + \sum_{k \neq n} \left\{ \frac{1}{T_{nk}} (\rho_{kk}(t) \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \rho_{kk}^0) \right\}, \quad (29.13, a)$$

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{V} \hat{\rho}]_{nn} + \frac{1}{T_1} \{ \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \}. \quad (29.13, б)$$

**29.1.2. Релаксація недіагональних матричних елементів.** Недіагональні матричні елементи не мають такої наочної інтерпретації, як діагональні елементи, які є ймовірностями заселення конкретних станів (конкретних рівнів енергії  $E_n$ ). Їх фізичний зміст полягає в тому, що вони визначають усереднений за станом термостата  $\alpha$  статистичний зв'язок між амплітудами заселення різних станів  $c_n(t)$  і  $c_m(t)$ . Якщо врахувати, що кожний із цих коефіцієнтів можна представити згідно з принципом суперпозиції у вигляді

$$c_n(\alpha, t) = b_n(\alpha, t) e^{-iE_n(\alpha)t/\hbar}, \quad (29.14)$$

то вираз для матриці густини набуде вигляду

$$\rho_{mn}(t) = \langle b_n^*(\alpha, t) b_m(\alpha, t) e^{i(E_n(\alpha) - E_m(\alpha))t/\hbar} \rangle_{\alpha}. \quad (29.15)$$

Очевидно, що неконтрольований вплив термостата на динамічну підсистему приводить і до неконтрольованої флуктуації положення рівнів енергії динамічної підсистеми та різниці між цими рівнями

$$E_n(\alpha) - E_m(\alpha) = E_n - E_m + \Delta E_{nm}(\alpha). \quad (29.16)$$

Можуть існувати різні фізичні механізми, які приводять до флуктуації положення рівнів енергії динамічної підсистеми та різниці між цими рівнями (29.16). Це може бути, наприклад, вплив флуктуючих електричного або магнітного мікрополів, які діють на атом (динамічну підсистему) з боку системи оточуючих цей атом інших атомів або іонів у газі, плазмі або конденсованому середовищі (з боку термостата). При такому впливі відбувається випадковий флуктуючий зсув рівнів енергії атома за рахунок ефектів Штарка або Зеємана.

При зростанні часу неконтрольовані флуктуації  $\Delta E_{nm}(\alpha)$  ведуть до неконтрольованих і необмежених флуктуацій фази

$$\Delta\varphi_{nm}(\alpha, t) = \Delta E_{nm}(\alpha)t / \hbar \quad (29.17)$$

у добутку  $c_n^*(\alpha, t)c_m(\alpha, t)$  у (29.15). Очевидно, що усереднення функції (29.15) із зростаючою флуктуацією фази  $\Delta\varphi_{nm}(\alpha, t)$  призводить до її зменшення, а при необмеженому зростанні часу – до повного зникнення статистичного зв'язку між різними станами системи, що відповідає умові

$$\rho_{mn}(t \rightarrow \infty) \rightarrow \rho_{mn}^0 = 0, \quad (29.18)$$

де  $\rho_{mn}^0 = 0$  – рівноважне значення недиагональних елементів матриці густини змішаного стану.

У статистичній механіці показано, що релаксаційний член у рівнянні (28.28) можна записати у вигляді виразу

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}^{relax} \hat{\rho}]_{mn} = -\frac{\rho_{mn}(t)}{\tau_{mn}}, \quad (29.19)$$

який подібний до (29.12, б), але відрізняється відсутністю рівноважного значення  $\rho_{mn}^0$ .

Остаточний вигляд рівняння руху для недиагональних матричних елементів такий:

$$\frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} = -i\omega_{mn}\rho_{mn} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{V}\hat{\rho}]_{mn} - \frac{\rho_{mn}(t)}{\tau_{mn}}. \quad (29.20)$$

Розв'язок цього рівняння при  $\hat{V} = 0$  має вигляд

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{mn}(0)e^{-i\omega_{mn}t - \frac{t}{\tau_{mn}}}. \quad (29.21)$$

При  $\hat{V} \neq 0$  незалежний розв'язок рівняння (29.20), яке містить як діагональні, так і недиагональні матричні елементи неможливий. Величина  $\tau_{mn}$  є *поперечним часом релаксації* й характеризує швидкість зникнення статистичного зв'язку між різними станами динамічної підсистеми. У чистому стані  $\tau_{mn} = \infty$ .

Терміни *повздовжній* і *поперечний час релаксації* вперше виникли при дослідженні процесів релаксації у дворівневій системі спінових магнітних моментів у твердому тілі, на які накладалось сильне магнітне поле. У цьому полі магнітні моменти швидко обертались по твірній конуса навколо напрямку поля, поступово повертаючись (зменшуючи кут при вершині конуса) та орієнтуючись уздовж поля.

Процес зміни сумарного моменту при поступовій орієнтації спінових моментів у напрямку поля відповідав повздовжній (уздовж поля) релаксації і характеризувався часом  $T_1$ . Зменшення осциляцій поперечного сумарного магнітного моменту відповідало взаємному дефазуванню окремих спінових магнітних моментів унаслідок флуктуючої дії мікрополів у кристалічній матриці та спаданню величини сумарного поперечного магнітного моменту із характерним часом релаксації  $\tau_{mn}$ , причому, як правило,  $\tau_{mn} \ll T_1$ .

## 29.2. Система самоузгоджених рівнянь для матриці густини та електромагнітного поля

Отримані рівняння руху для діагональних (29.13) і недиагональних (29.20) матричних елементів визначають зміну динамічної підсистеми під дією збурення  $\hat{V}$ . Зокрема під час дії на динамічну підсистему електромагнітного поля енергія взаємодії цього поля з атомом у дипольному наближенні визначається виразом  $\hat{V} = -\vec{d}\vec{E}(\vec{r}, t)$ . У цьому випадку система рівнянь для діагональних і недиагональних матричних елементів матриці густини має вигляд

$$\frac{\partial \rho_{nn}(t)}{\partial t} = -\frac{\vec{E}}{i\hbar} \sum_k \{ \vec{d}_{nk} \rho_{kn} - \rho_{nk} \vec{d}_{kn} \} + \sum_{k \neq n} \left\{ \frac{1}{T_{nk}} (\rho_{kk}(t) \rho_{nn}^0 - \rho_{nn}(t) \rho_{kk}^0) \right\}, \quad (29.22)$$

$$\frac{\partial \rho_{mn}(t)}{\partial t} = -i\omega_{mn} \rho_{mn} - \frac{1}{i\hbar} \vec{E} \sum_k \{ \vec{d}_{mk} \rho_{kn} - \rho_{mk} \vec{d}_{kn} \} - \frac{\rho_{mn}(t)}{\tau_{mn}}. \quad (29.23)$$

Кількість рівнянь цієї системи, які необхідно розв'язати, може бути істотно зменшеною, якщо врахувати додаткові умови

$$\rho_{mn}(t) = \rho_{nm}^*(t), \quad \sum_n \rho_{nn}(t) = 1. \quad (29.24)$$

Ця система дозволяє визначити зміну  $\rho_{mn}(t)$  під дією електромагнітного поля  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ . Водночас зміна матричних елементів  $\rho_{mn}(t)$  приводить до того, що в системі атомів виникає вектор поляризації (сумарний дипольний момент):

$$\vec{P} = n_a \langle \vec{d} \rangle = n_a \sum_{nm} \rho_{nm} \vec{d}_{mn}, \quad (29.25)$$

який впливає на поле  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ ;  $n_a$  – концентрація атомів. Для того, щоб врахувати цей вплив, необхідно доповнити систему рівнянь (29.22) і (29.23), додавши хвильове рівняння, у якому джерелом електромагнітного поля є вектор поляризації системи атомів (29.25). Це хвильове рівняння можна знайти із системи рівнянь Максвелла. У немагнітному середовищі без вільних зарядів рівняння Максвелла мають вигляд

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{H} &= \frac{4\pi}{c} \vec{j}_e + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, & \nabla \times \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \nabla \vec{D} &= 0, & \nabla \vec{H} &= 0, & \vec{D} &= \varepsilon \vec{E}. \end{aligned} \quad (29.26)$$

Застосувавши операцію визначення ротора  $[\nabla \times]$  до другого рівняння системи (29.26) і підставивши в отримане рівняння

$$\nabla \nabla \vec{E} - \Delta \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \vec{H}$$

четверте та друге рівняння системи (29.26), приходимо до хвильового рівняння

$$\Delta \vec{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial \vec{j}_e}{\partial t} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2}. \quad (29.27)$$

При отриманні рівняння (21.27) враховано зв'язок між густиною електричного струму та вектором поляризації середовища

$$\vec{j}_e = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}. \quad (29.28)$$

Підставляючи в (29.27) співвідношення (29.23), отримаємо рівняння

$$\Delta \vec{E} - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \frac{4\pi n_a}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \sum_{nm} \rho_{nm} \vec{d}_{mn}, \quad (29.29)$$

яке описує вплив середовища на поле  $\vec{E}$ . Самоузгоджена система рівнянь (29.22), (29.23) і (29.29) є повною й дозволяє обчислити взаємно узгоджену зміну електромагнітного поля та середовища. Такі рівняння використовуються при розрахунку різних нелінійних і активних систем, наприклад лазерних.

### Контрольні запитання

1. Які процеси впливають на релаксацію недиагональних елементів матриці густини?
2. Чи може збігатися (а якщо так, то коли) час повздовжньої та поперечної релаксації матриці густини?
3. Як забезпечується самоузгоджений розгляд рівняння для речовини та поля в наближенні матриці густини?

**Література:** [4], § 14; [7], гл.3.

**Додаткова література:** [1].

## Розділ XI

### РЕЛЯТИВІСТСЬКІ СИСТЕМИ ТА РІВНЯННЯ У КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ

#### § 30. Релятивістські рівняння квантової механіки

##### 30.1. Релятивістські ефекти як збурення нерелятивістських систем

Стационарне та нестационарне рівняння Шредінгера

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \Psi_{n\alpha}(\vec{r}) &= E_n \Psi_{n\alpha}(\vec{r}), \alpha = \{lm\}, \\ i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t), \\ \hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}), \end{aligned} \quad (30.1)$$

які використовувалися при розгляді властивостей атома, отримані на основі нерелятивістського оператора Гамільтона  $\hat{H}_0$ . При розгляді релятивістських явищ для позначення маси електрона або іншої частинки будемо використовувати позначення  $m_e$  (у задачах, пов'язаних з релятивістськими перетвореннями, індекс  $\mu$  традиційно використовується для позначення чотиривимірних величин). Цей оператор обчислюється при розкладі виразу для енергії

$$\varepsilon = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4} + e\phi(\vec{r}) \approx m_e c^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}), U(\vec{r}) = e\phi(\vec{r}) \quad (30.2)$$

з точністю до першого порядку за величиною  $(p/m_e c)^2 \ll 1$  і при використанні заміни

$$E = \varepsilon - m_e c^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}) \rightarrow \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}). \quad (30.3)$$

Для визначення впливу "слабкого" релятивізму, врахуємо наступний член розкладу (30.2). Після використання заміни (30.3) отримаємо

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2} + U(\vec{r}) = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{V} = -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2}. \quad (30.4)$$

Поява додаткового виразу  $\hat{V}$  є виявом релятивістських ефектів. Цей вираз залежить від швидкості світла  $c$  і зникає при формальному граничному переході  $c \rightarrow \infty$ . Рівняння Шредінгера з оператором Гамільтона (30.4)

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (30.5)$$

можна розв'язати методом теорії збурень, вважаючи  $\hat{V}$  оператором збурення.

У загальному випадку задача про визначення впливу невеликих за обсягом релятивістських ефектів на спектр атомних рівнів відповідає виродженому випадку, на якому вже зупинялись. Розглянемо цей вплив на прикладі атома водню, для якого  $U(\vec{r}) = -Ze^2/r$ . Кожному стану енергії  $E_n$  у першому порядку стаціонарної теорії збурень відповідає функція

$$\Psi_n(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l a_{nlm} \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi), \quad \Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (30.6)$$

яка характеризує суперпозиційний стан.

Коефіцієнти  $a_{nlm}$  визначаються, як розв'язок системи рівнянь (17.35):

$$\begin{cases} (E_n - E + V_{n00;n00})a_{n00} + \sum_{l \neq 0} \sum_{m \neq 0} a_{nlm} V_{n00;nlm} = 0, \\ (E_n - E + V_{n01;n01})a_{n01} + \sum_{l \neq 0} \sum_{m \neq 1} a_{nlm} V_{n01;nlm} = 0, \\ \dots \\ (E_n - E + V_{n(n-1)(n-1);n(n-1)(n-1)})a_{n(n-1)(n-1)} + \sum_{l \neq n-1} \sum_{m \neq (n-1)} a_{nlm} V_{n(n-1)(n-1);nlm} = 0, \end{cases} \quad (30.7)$$

а власні значення енергії  $E$  збуреного рівняння Шредінгера (30.5) задовольняють умову (17.36):

$$\begin{vmatrix} (E_n - E + V_{n00;n00}) & V_{n00;n01} & \dots & V_{n00;n(n-1)(n-1)} \\ V_{n01;n00} & (E_n - E + V_{n01;n01}) & \dots & V_{n01;n(n-1)(n-1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{n(n-1)(n-1);n00} & V_{n(n-1)(n-1);n01} & \dots & (E_n - E + V_{n(n-1)(n-1);n(n-1)(n-1)}) \end{vmatrix} = 0. \quad (30.8)$$

Спочатку необхідно визначити всі матричні елементи  $V_{nlm;nl'm'}$  з рівняння (30.8). Виходячи з аксіальної симетрії оператора збурення  $\hat{V}$  (30.4), знаходимо

$$V_{nlm,nl'm'} = \int_0^\infty R_{nl}(r) \hat{V} R_{n'l'}(r) r^2 dr \int_{4\pi} Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) d\Omega = V_{nlm,nlm} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (30.9)$$

Звідси випливає, що врахування "слабкого" релятивізму приводить до зняття виродження, а спектр відповідних рівнів визначається з рівняння

$$\prod_{l=0}^{n-1} \prod_{m=-l}^l (E - E_n - V_{nml,nml}) = 0. \quad (30.10)$$

Діагональні матричні елементи енергії збурення визначаються за допомогою співвідношення

$$V_{nlm,nlm} = -\frac{1}{8m_e^3 c^2} \int \Psi_{nlm}^* \hat{p}^4 \Psi_{nlm} d^3r, \quad (30.11)$$

яке можна спростити, якщо використати заміну

$$\hat{p}^2 = 2m_e(\hat{H}_0 - U(\vec{r})), \quad (30.12)$$

яка випливає з (30.1); умову самоспряженості оператора  $(\hat{H}_0 - U(r))$ ; обставину, що функції  $\Psi_{nlm}$  є власними функціями незбуреного оператора Гамільтона  $\hat{H}_0$  (30.1):

$$\begin{aligned} V_{nlm,nlm} &= -\frac{1}{2m_e c^2} \int \Psi_{nlm}^* (\hat{H}_0 - U(r))^2 \Psi_{nlm} d^3r = \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \int \Psi_{nlm}^* (\hat{H}_0 - U(r)) \{ (\hat{H}_0 - U(r)) \Psi_{nlm} \} d^3r = \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \int \Psi_{nlm}^* (\hat{H}_0 - U(r)) \{ (E_n - U(r)) \Psi_{nlm} \} d^3r = \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \int \{ (E_n - U(r)) \Psi_{nlm} \} (\hat{H}_0^* - U(r)) \Psi_{nlm}^* d^3r = \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \int \Psi_{nlm}^* (E_n^2 - 2E_n U(r) + U^2(r)) \Psi_{nlm} d^3r = \\ &= -\frac{1}{2m_e c^2} \left\{ E_n^2 + 2E_n Z e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm,nlm} + Z^2 e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm,nlm} \right\}. \end{aligned} \quad (30.13)$$

Середні значення операторів  $r^{-1}$  і  $r^{-2}$  у станах з водневими хвильовими функціями  $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$  можна знайти в загальному випадку, вони мають вигляд

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm,nlm} = \frac{Z}{a n^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm,nlm} = \frac{Z^2}{a^2 n^3 (l+1/2)}, \quad a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}. \quad (30.14)$$

Враховуючи ці результати, знаходимо

$$V_{nlm,nlm} = -\frac{E_n^2}{2m_e c^2} \left( \frac{4n}{l+1/2} - 3 \right) < 0. \quad (30.15)$$

З урахуванням (30.10) випливає, що наявність "слабкого" релятивізму приводить до зняття виродження за орбітальним квантовим числом і розщепленням кожного стану з енергією  $E_n$  у  $n$  різних рівнів

$$E = E_n - \frac{E_n^2}{2m_e c^2} \left( \frac{4n}{l+1/2} - 3 \right), \quad l = 0, 1, \dots, n-1. \quad (30.16)$$

Таким чином, врахування "слабкого" релятивізму приводить до зсуву вниз усіх рівнів енергії, які утворились при знятті виродження. Очікуваний ефект пов'язаний зі збільшенням ефективної маси електрона, що є наслідком теорії відносності.

Аналогічним чином, використовуючи представлення (30.3), можна провести узагальнення нестационарного рівняння Шредінгера для випадку систем, які рухаються з невеликою швидкістю  $v \ll c$ :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^3 c^2}) \Psi(\vec{r}, t) \equiv (\hat{H}_0 - \frac{(\hat{H}_0 - U(\vec{r}))^2}{2m_e c^2}) \Psi(\vec{r}, t). \quad (30.17)$$



### 30.2. Релятивістське рівняння Клейна – Гордона – Фока

Рівняння Шредінгера відповідає принципу відносності Галілея й не змінює свого вигляду при переході між різними інерційними системами координат, які рухаються з різними швидкостями. Воно не є лоренц-інваріантним. Узагальнення (30.17) втрачає законність при зростанні швидкостей частинок. Хвильове рівняння, яке описує релятивістські системи, має бути релятивістсько-інваріантним, тобто час і просторові змінні повинні входити до нього з однаковим порядком похідних. При побудові такого рівняння за основу треба брати вираз для повної енергії частинки, яка вільно рухається з довільним імпульсом  $\vec{p}$ :

$$\varepsilon = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4}. \quad (30.18)$$

Якщо врахувати явний вигляд операторів

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \quad \varepsilon \rightarrow \hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (30.19)$$

то алгебраїчне рівняння (30.18) можна перетворити на операторне співвідношення

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \sqrt{m_e^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta}, \quad (30.20)$$

дія якого на хвильову функцію  $\Psi(\vec{r}, t)$  приводить до хвильового рівняння

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \sqrt{m_e^2 c^4 - \hbar^2 c^2 \Delta} \Psi(\vec{r}, t). \quad (30.21)$$

Це рівняння за розмірністю є лоренц-інваріантним, але оператор у формі квадратного кореня в правій частині (30.21) не є лінійним, що порушує постулати квантової механіки. Лінійність можна відновити, якщо позбутися квадратного кореня. У нерелятивістському випадку це можна зробити, розкладаючи корінь у ряд, що забезпечує лінійність, але порушує умову релятивістської інваріантності.

Найпростішим методом забезпечення одночасно лоренц-інваріантності та лінійності є використання квадрата співвідношення (30.18):

$$\varepsilon^2 = \vec{p}^2 c^2 + m_e^2 c^4, \quad (30.22)$$

яке можна записати у чотиривимірному вигляді

$$\sum_{\mu=0}^3 p_{\mu}^2 = -m_e^2 c^4, \quad (30.23)$$

якщо ввести 4-вектор імпульсу

$$p_{\mu} = \left\{ i \frac{\varepsilon}{c}, \vec{p} \right\}. \quad (30.24)$$

Ці співвідношення легко узагальнити

$$p_{\mu} \rightarrow p_{\mu} - \frac{q}{c} A_{\mu} \quad (30.25)$$

на випадок наявності чотиривимірного потенціалу (4-потенціалу)

$$A_{\mu} = \{iA_0, \vec{A}\}, \quad A_0 = \varphi, \quad (30.26)$$

який діє на частинку із зарядом  $q$  (для електрона  $q = -e$ ).

Якщо перейти у формулах (30.22) – (30.26) від конкретних фізичних величин до операторів

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \quad \varepsilon \rightarrow \hat{\varepsilon} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (30.27)$$

$$\vec{A}(r, t) \rightarrow \hat{\vec{A}}(r, t) \equiv \vec{A}(r, t), \quad \varphi(\vec{r}) \rightarrow \hat{\varphi}(\vec{r}) \equiv \varphi(\vec{r})$$

і подіяти отриманим операторним співвідношенням (30.23) на функцію  $\Psi(\vec{r}, t)$ , то отримаємо хвильове рівняння

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\varphi(\vec{r}) \right)^2 \Psi(\vec{r}, t) = \left( \left( i\hbar\nabla + \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 c^2 + m_e^2 c^4 \right) \Psi(\vec{r}, t), \quad (30.28)$$

яке називають *нестационарним рівнянням Клейна – Гордона – Фока*.

У стаціонарному випадку, до якого можна перейти, поклавши

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) e^{-i \frac{\varepsilon}{\hbar} t}, \quad A(\vec{r}, t) = A(\vec{r}),$$

отримуємо стаціонарне рівняння Клейна – Гордона – Фока

$$(\varepsilon - q\varphi(\vec{r}))^2 \Psi(\vec{r}, t) = \left( \left( i\hbar\nabla + \frac{q}{c} \vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 c^2 + m_e^2 c^4 \right) \Psi(\vec{r}, t). \quad (30.29)$$

У вільному просторі (при  $A(\vec{r}, t) = 0, \varphi(\vec{r}) = 0$ ) рівняння (30.28) набуває вигляду

$$\Delta \Psi(\vec{r}, t) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = k_c^2 \Psi(\vec{r}, t), \quad k_c = \frac{m_e c}{\hbar}. \quad (30.30)$$

У рівнянні (30.30)  $k_c$  – *комтонівське хвильове число*, якому відповідає *комтонівська довжина хвилі*  $\lambda_c = 1/k_c$ . Це рівняння описує вільний рух частинок без урахування їх спіну (напр., рух  $\pi$ -мезонів, які є переносниками ядерної взаємодії). При формальному граничному пе-

реході  $m_e \rightarrow 0$  рівняння (30.30) переходить у звичайне хвильове рівняння для фотонів.

Із (30.30) можна отримати рівняння неперервності. Для цього спочатку помножимо всі його члени на функцію  $\Psi^*(\vec{r}, t)$ , а потім візьмемо рівняння, комплексно спряжене до (30.30), і помножимо його на  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Отримаємо два рівняння. Після цього від першого рівняння віднімемо друге й отримаємо співвідношення

$$\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} \Psi = c^2 \Psi^* \Delta \Psi - c^2 (\Delta \Psi^*) \Psi, \quad (30.31)$$

яке легко перетворити на тотожний вигляд

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) + c^2 \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) = 0. \quad (30.32)$$

Якщо це рівняння помножити на величину  $i\hbar/2m_e c^2$ , то отримаємо рівняння неперервності

$$\frac{\partial \rho_{\text{КГФ}}}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0, \quad (30.33)$$

$$\rho_{\text{КГФ}} = \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right), \quad \vec{j} = \frac{i\hbar}{2m_e} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

зі стандартним виразом для густини струму ймовірності  $\vec{j}$ . Специфіка цього рівняння полягає в тому, що густина ймовірності  $\rho_{\text{КГФ}}$ , яка у випадку нестационарного нерелятивістського рівняння Шредінгера є додатною величиною й має вигляд

$$\rho_{\text{Шред}} = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \geq 0, \quad (30.34)$$

у випадку рівняння Клейна – Гордона – Фока може бути як додатною, так і від'ємною величиною. Це – істотний недолік даного рівняння.

Причина невизначеності зі знаком густини ймовірності пов'язана з тим, що в релятивістській фізиці при швидкій зміні хвильової функції (а це відповідає великому знакозмінному значенню похідних за часом у виразі для  $\rho_{\text{КГФ}}$ ) може існувати випадок, що веде до народження частинок. Цей ефект безпосередньо впливає зі співвідношення невизначеності для середньоквадратичних значень флуктуацій енергії та часу для некорельованих станів  $\Delta E \geq \hbar/2\Delta t$ . При зміні хвильової функції за час, менший від  $\Delta t \leq \hbar/2m_e c^2$ , середньоквадратична флуктуація енергії перевищує порогове значення  $\Delta E_{\text{пор}} = 2m_e c^2$ , достатнє для наро-

дження пари частинка – античастинка. Оскільки кожне з рівнянь Клейна – Гордона – Фока описує об'єкти тільки одного типу (напр. частинки), то поява додаткових частинок у результаті процесу народження пари (або їх зникнення в результаті анігіляції з античастинкою) приводить до формального парадоксу відносно зміни знака  $\rho_{\text{КГФ}}$ . Ситуація була б зовсім іншою і парадокс був би відсутній, якби це рівняння враховувало всі можливі типи пов'язаних між собою частинок і античастинок. У цьому разі їх арифметична сума з урахуванням знака була б постійною. Це відбувається тільки у випадку рівняння з багатокомпонентною хвильовою функцією – рівняння Дірака, яке розглянемо далі.

Із рівняння Клейна – Гордона – Фока у випадку малої різниці між повною енергією частинки та енергією спокою ( $|\varepsilon - m_e c^2|/m_e c^2 \equiv |E|/m_e c^2 \ll 1$ ) і за умови слабкого потенціалу  $|e\varphi|/m_e c^2 \ll 1$  впливає рівняння Шредінгера. Для цього представимо хвильову функцію у вигляді

$$\Psi(\vec{r}, t) = \tilde{\Psi}(\vec{r}, t) e^{-i \frac{m_e c^2}{\hbar} t} \quad (30.35)$$

і підставимо її в рівняння (30.28), у якому покладено  $\vec{A}(\vec{r}, t) = 0$ :

$$\left\{ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} - 2i\hbar q\varphi(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} + (q\varphi(\vec{r}))^2 + \hbar^2 c^2 \Delta - m_e^2 c^4 \right\} \Psi(\vec{r}, t) =$$

$$= \left\{ 2i\hbar m_e c^2 \frac{\partial}{\partial t} \left( 1 - \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right) \tilde{\Psi} + \hbar^2 c^2 \Delta \tilde{\Psi} - \right.$$

$$\left. - 2m_e c^2 q\varphi(\vec{r}) \left( 1 - \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{q\varphi(\vec{r})}{2m_e c^2} \right) \tilde{\Psi} \right\} e^{-i \frac{m_e c^2}{\hbar} t} = 0. \quad (30.36)$$

Якщо розділити кожний член отриманого рівняння на  $2m_e c^2$ , то отримаємо нестационарне рівняння, яке подібне до рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( 1 - \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right) \tilde{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \tilde{\Psi} + q\varphi(\vec{r}) \left( 1 - \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right) \tilde{\Psi} - \frac{(q\varphi(\vec{r}))^2}{2m_e c^2} \tilde{\Psi}.$$

Вирази, які стоять у круглих дужках і містять похідну за часом, при малій додатковій (порівняно з  $2m_e c^2$ ) енергії є малими

$$\left| \frac{i\hbar}{2m_e c^2} \frac{\partial}{\partial t} \right| \approx \left| \frac{E}{2m_e c^2} \right| \ll 1$$

і ними можна знехтувати. Отримане рівняння

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + q\phi(\vec{r}) - \frac{(q\phi(\vec{r}))^2}{2m_e c^2} \right\} \tilde{\Psi} \quad (30.37)$$

у випадку слабкого потенціалу (при  $|q\phi(\vec{r})| \ll 2m_e c^2$ ) повністю збігається з нестационарним рівнянням Шредінгера.

Якщо ж потенціал дуже сильний (напр.  $|q\phi(\vec{r})| > 2m_e c^2$ ), ситуація істотно змінюється. Додатковий член  $-(q\phi(\vec{r}))^2 / 2m_e c^2$  у виразі для потенціальної енергії завжди від'ємний і відповідає додатковому притяганню незалежно від знака заряду частинки. У цьому випадку існує таке нетривіальне явище, як притягання на малій відстані (для випадку кулонівської взаємодії зарядів – на відстані  $r < |q_1 q_2| / m_e c^2$ ) зарядів однакового знака. Для зарядів різного знака на малій відстані притягання стає більш сильним. В обох випадках на дуже малій відстані притягання зарядів відповідає закону  $V_{\text{притяг}} \sim (-1/r^2)$ .

Явище нелінійного притягання пов'язане з тим, що в сильному потенціалі народжуються електрон-позитронні пари, які перерозподіляються в просторі таким чином, що екранують сили відштовхування й підсилюють сили притягання. Такий самий доданок виникає й у стаціонарному рівнянні Шредінгера:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta + q\phi(\vec{r}) - \frac{(q\phi(\vec{r}))^2}{2m_e c^2} \right\} \tilde{\Psi}(\vec{r}) = E \tilde{\Psi}(\vec{r}), \quad (30.38)$$

якщо його отримати за допомогою підстановки

$$\Psi(\vec{r}, t) = \tilde{\Psi}(\vec{r}) e^{-i \frac{\varepsilon}{\hbar} t}, \quad \varepsilon = m_e c^2 + E, \quad |E| \ll m_e c^2 \quad (30.39)$$

із рівняння (30.29).

Якщо частинка рухається з дуже великим імпульсом  $p_z \gg m_e c$  і має велику повну енергію, її рух у слабкому потенціалі визначається за допомогою підстановки

$$\Psi(\vec{r}, t) = \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp) e^{-i \left( \frac{\varepsilon t - p_z z}{\hbar} \right)}, \quad (30.40)$$

$$\varepsilon = \sqrt{p_z^2 c^2 + m_e c^2} + E = \gamma m_e c^2 + E, \quad |E| \ll \gamma m_e c^2,$$

де

$$\gamma = \varepsilon / m_e c^2 = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \gg 1 \quad (30.41)$$

є лоренц-фактором для рухомої частинки.

Із рівняння (30.28) при  $\vec{A}(\vec{r}, t) = 0$  отримуємо рівняння

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\gamma m_e} \Delta_\perp + q\phi(\vec{r}) - \frac{(q\phi(\vec{r}))^2}{2\gamma m_e c^2} \right) \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp) = E \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp), \quad (30.42)$$

яке подібне до стаціонарного рівняння Шредінгера. У ньому також є доданок з нелінійним потенціалом, але його величина в  $\gamma \gg 1$  разів менша, ніж у нерелятивістському випадку. Якщо  $|q\phi(\vec{r})| \ll 2\gamma m_e c^2$ , то рівняння набуває вигляду

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\gamma m_e} \Delta_\perp + q\phi(\vec{r}) \right) \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp) = E \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp), \quad (30.43)$$

звичайного стаціонарного рівняння Шредінгера в лабораторній системі координат для частинки з релятивістською масою  $\gamma m_e$ . Якщо його помножити на  $\gamma$ , то отримаємо рівняння для частинки з нерелятивістською масою, яка рухається в зміненому потенціальному полі

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_\perp + \gamma q\phi(\vec{r}) \right) \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp) = \gamma E \tilde{\Psi}(\vec{r}_\perp). \quad (30.44)$$

Це рівняння буде відповідати супутній системі координат, яка рухається разом із частинкою відносно поля. У такій системі, як відомо, відбувається релятивістське перетворення потенціалу, тобто збільшення поперечного до руху частинки потенціалу в  $\gamma$  разів.

### Контрольні запитання

1. Чи впливають релятивістські поправки до рівняння Паулі на спінові характеристики атома?
2. Які типи частинок описує рівняння Клейна – Гордона – Фока?
3. Яким чином рівняння Клейна – Гордона Фока можна перетворити на рівняння Шредінгера з релятивістською масою?
4. Які основні недоліки має рівняння Клейна – Гордона – Фока?

**Література:** [2], § 59; [6], § 3.

**Додаткова література:** [IV].

## § 31. Рівняння Дірака

### 31.1. Стаціонарне та нестаціонарне рівняння Дірака

Рівняння Клейна – Гордона – Фока успішно застосовується при розгляді багатьох задач, пов'язаних з рухом частинок високої енергії, якщо в цих задачах роль спіну є неістотною. Водночас область його використання є обмеженою, оскільки це рівняння не враховує ні спіну частинок, ні народження та взаємоперетворення частинок. Це рівняння, хоча й є релятивістським, але воно не задовольняє всі необхідні умови.

Перелічимо умови, яким має задовольняти коректне рівняння, що може адекватно описати рух частинок з довільною (у т. ч., дуже великою) енергією. Рівняння має бути:

а) лоренц-інваріантним (для цього воно має бути одного порядку за просторовими та часовими змінними);

б) лінійним (щоб задовольняти принцип суперпозиції);

в) першого порядку відносно похідної  $\partial/\partial t$  (для того, щоб задовольнити основний постулат квантової механіки, згідно з яким поведінка функції зі зміною часу визначається тільки величиною самої функції в конкретний момент часу (це аналог початкової умови), що неможливо, коли вона залежатиме від похідної другого порядку);

г) таким, щоб його розв'язки відповідали додатній густині ймовірності.

При побудові рівняння, яке задовольняло б усі вищенаведені умови, за основу, як і у випадку рівняння Клейна – Гордона – Фока, треба брати вираз для операторного вигляду повної енергії рухомої частинки

$$\hat{\varepsilon} = c\sqrt{\hat{p}^2 + m_e^2 c^2}. \quad (31.1)$$

Якщо врахувати явний вигляд операторів

$$\vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar\nabla, \quad \varepsilon \rightarrow \hat{\varepsilon} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad (31.2)$$

які входять до складу рівності, то виникає проблема лінеаризації виразу, що містить оператор імпульсу.

Метод Клейна – Гордона – Фока (лінеаризація за допомогою підведення до квадрата) задовольняє умови а) та б) і приводить до рівняння другого порядку відносно часової змінної, що суперечить умовам

в) і г). Рівняння Шредингера відповідає умовам а), б) і в), але суперечить умові а).

П. Дірак у 1928 р. запропонував метод лінеаризації співвідношення (31.1), який відповідає всім умовам: а) – г). Якщо тимчасово (для спрощення обчислення) ввести вектор із чотирьох компонент (це не 4-імпульс!)

$$p_\mu = \{m_e c, \vec{p}\}, \quad (31.3)$$

то підкореневий вираз у (31.1) можна записати в компактному вигляді

$$\hat{p}^2 + m^2 c^2 = \sum_{\mu=0}^3 \hat{p}_\mu^2. \quad (31.4)$$

Підставимо це співвідношення в (31.1) і знайдемо оператори  $\alpha_\mu$ , за допомогою яких можна здійснити операцію лінеаризації квадратного кореня

$$\hat{\varepsilon} = c\sqrt{\sum_{\mu=0}^3 \hat{p}_\mu^2} = c\sum_{\mu=0}^3 \alpha_\mu \hat{p}_\mu = \alpha_0 m_e c^2 + \vec{\alpha} \vec{p} c. \quad (31.5)$$

Для визначення  $\alpha_\mu$  підведемо (31.5) до квадрата, враховуючи, що коректною формою при побудові виразу для добутку невизначених за порядком розташування операторів є півсума їх перестановок:

$$\hat{\varepsilon}^2 = c^2 \sum_{\mu=0}^3 \hat{p}_\mu^2 = c^2 \sum_{\mu=0}^3 \sum_{\mu'=0}^3 \alpha_\mu \alpha_{\mu'} \hat{p}_\mu \hat{p}_{\mu'} = c^2 \sum_{\mu=0}^3 \sum_{\mu'=0}^3 \frac{\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu}{2} p_\mu \hat{p}_{\mu'}. \quad (31.6)$$

Порівняння початку та кінця цього співвідношення приводить до умов, яким мають задовольняти невідомі оператори

$$\alpha_\mu \alpha_{\mu'} + \alpha_{\mu'} \alpha_\mu = 2\delta_{\mu\mu'}, \quad \alpha_{\mu\mu'} = 1. \quad (31.7)$$

Враховуючи, що індекс  $\mu$  набуває чотирьох значень, яким відповідають чотири різних фізичних величини (три компоненти імпульсу  $\vec{p}$  і комптонівський імпульс  $m_0 c$ ), очевидно, що в загальному випадку кожен з компонент оператора  $\hat{\alpha}_\mu$  можна представити у вигляді матриці з розмірністю  $4 \times 4$ :

$$\hat{\alpha}_\mu = \{(\alpha_\mu)_{nm}\}; \quad n, m = 1, 2, 3, 4. \quad (31.8)$$

Підставляючи ці матриці у співвідношення (31.7) і прирівнюючи відповідні компоненти матриць, отримуємо

$$\hat{\alpha}_1 \equiv \hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_x \\ \hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_2 \equiv \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_y \\ \hat{\sigma}_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (31.9)$$

$$\hat{\alpha}_3 \equiv \hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_z \\ \hat{\sigma}_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_0 \equiv \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix}.$$

В останньому виразі позначення матриці  $\hat{\alpha}_0$  замінено на  $\hat{\beta}$ . До складу отриманих матриць Дірака  $\hat{\beta}$  входять матриці Паулі  $\hat{\sigma}_z$  та одинична матриця  $\hat{I}$ . Вони є самоспряженими та унітарними

$$\hat{\alpha}_\mu^+ = \hat{\alpha}_\mu. \quad (31.10)$$

Якщо подіяти операторним рівнянням (31.5) на хвильову функцію  $\Psi(\vec{r}, t)$ , то отримуємо рівняння Дірака для вільного руху частинки

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) \equiv (\beta m_e c^2 + c\hat{\alpha}\hat{p})\Psi(\vec{r}, t) = \varepsilon\Psi(\vec{r}, t). \quad (31.11)$$

У цьому операторному рівнянні хвильова функція є чотирикомпонентною матрицею-стовбчиком (*біспінором*)

$$\Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r}, t) \\ \Psi_2(\vec{r}, t) \\ \Psi_3(\vec{r}, t) \\ \Psi_4(\vec{r}, t) \end{pmatrix}, \quad (31.12)$$

де кожна з компонент  $\Psi_n(\vec{r}, t)$  описує певний стан частинки.

За наявності відповідних потенціалів і заряду частинки  $q$  проведемо узагальнення (31.11) й отримуємо стаціонарне рівняння Дірака

$$\left\{ c\hat{\alpha}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right) + \beta m_e c^2 + V(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}, t) = \varepsilon\Psi(\vec{r}, t), \quad (31.13)$$

використовуючи стандартну заміну

$$\hat{p} \rightarrow \hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}, \quad \varepsilon \rightarrow \hat{\varepsilon} - q\phi(\vec{r}) \equiv \hat{\varepsilon} - V(\vec{r}), \quad (31.14)$$

де  $V(\vec{r}) = q\phi(\vec{r})$  – потенціальна енергія частинки.

Використовуючи заміну (31.2), рівняння (31.13) можна записати у формі нестационарного рівняння Дірака

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -c\hat{\alpha}\left(i\hbar\nabla + \frac{q}{c}\vec{A}\right) + V(\vec{r}) + \beta m_e c^2 \right\} \Psi(\vec{r}, t). \quad (31.15)$$

Ці самі рівняння можна записати у більш конкретному вигляді, якщо розділити чотирикомпонентну функцію (31.12) на дві двокомпонентні

$$\Psi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}, t) \\ \chi(\vec{r}, t) \end{pmatrix}; \quad \varphi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}; \quad \chi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}, \quad (31.16)$$

які називаються *спінорами*. Підставляючи їх, а також матриці Дірака (31.9), виражені через матриці Паулі, у рівняння (31.13), отримуємо модифікований запис стаціонарного рівняння Дірака

$$\left\{ c \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \left( \hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A} \right) + \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} m_e c^2 \right\} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix} = \{\varepsilon - V(\vec{r})\} \begin{pmatrix} \varphi(\vec{r}) \\ \chi(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad (31.17)$$

Це чотирикомпонентне операторне рівняння можна перетворити на два рівняння для спінорів  $\varphi(\vec{r})$  і  $\chi(\vec{r})$ :

$$c\hat{\sigma}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\chi(\vec{r}) = (\varepsilon - m_e c^2 - V(\vec{r}))\varphi(\vec{r}); \quad (31.18)$$

$$c\hat{\sigma}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\varphi(\vec{r}) = (\varepsilon + m_e c^2 - V(\vec{r}))\chi(\vec{r}).$$

Аналогічно можна перетворити нестационарне рівняння Дірака (31.15):

$$c\hat{\sigma}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\chi(\vec{r}, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - m_e c^2 - V(\vec{r})\right)\varphi(\vec{r}, t); \quad (31.19)$$

$$c\hat{\sigma}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)\varphi(\vec{r}, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + m_e c^2 - V(\vec{r})\right)\chi(\vec{r}, t).$$

## 31.2. Рівняння неперервності та вектор густини струму для частинок Дірака

На основі нестационарного рівняння Дірака (31.15) можна побудувати рівняння неперервності та отримати відповідні вирази для густини ймовірності та вектора струму ймовірності. Для цього запишемо

рівняння (31.15) для функції  $\Psi(\vec{r}, t)$  (31.12) і спряжене рівняння для спряженої функції

$$\Psi^+(\vec{r}, t) = \overline{\Psi_1^*(\vec{r}, t) \Psi_2^*(\vec{r}, t) \Psi_3^*(\vec{r}, t) \Psi_4^*(\vec{r}, t)}, \quad (31.20)$$

попередньо помноживши функцію  $\Psi^+(\vec{r}, t)$  (31.20) на кожний член першого рівняння і відповідно кожний член другого рівняння на функцію  $\Psi(\vec{r}, t)$  (31.12):

$$\begin{cases} i\hbar\Psi^+ \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -i\hbar c\Psi^+ \vec{\alpha} \nabla\Psi - q\vec{A}\Psi^+ \vec{\alpha}\Psi + q\phi(\vec{r})\Psi^+\Psi + m_e c^2 \Psi^+ \beta \Psi, \\ -i\hbar \frac{\partial\Psi^+}{\partial t} \Psi = i\hbar c(\nabla\Psi^+) \vec{\alpha}^+ \Psi - q\vec{A}\Psi^+ \vec{\alpha}^+ \Psi + q\phi(\vec{r})\Psi^+\Psi + m_e c^2 \Psi^+ \beta^+ \Psi. \end{cases} \quad (31.21)$$

При отриманні другого рівняння для  $\Psi^+(\vec{r}, t)$  у (31.21) використано рівність  $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+ \hat{A}^+$ , яка справедлива для добутку матриць  $\vec{\alpha}, \beta, \Psi, \nabla\Psi$ .

Віднімаючи друге рівняння від першого і враховуючи самоспряженість матриць Дірака  $\vec{\alpha}^+ = \vec{\alpha}, \beta^+ = \beta$ , отримуємо рівняння неперервності

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^+\Psi + \nabla(c\Psi^+ \vec{\alpha} \Psi) = 0, \quad (31.22)$$

з якого знаходимо вирази для густини ймовірності

$$\rho = \Psi^+\Psi = \sum_{n=1}^4 |\Psi_n|^2 \quad (31.23)$$

і густини струму ймовірності

$$\vec{j} = c\Psi^+ \vec{\alpha} \Psi = c \sum_{m,n=1}^4 \Psi_n^* \vec{\alpha}_{nm} \Psi_m. \quad (31.24)$$

Наприклад, вираз для  $j_x$  має вигляд

$$j_x = c\Psi^+ \alpha_x \Psi = c \sum_{m,n=1}^4 \Psi_n^* (\alpha_x)_{nm} \Psi_m = c \overline{\Psi_1^* \Psi_2^* \Psi_3^* \Psi_4^*} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix} = c(\Psi_1^* \Psi_4 + \Psi_2^* \Psi_3 + \Psi_3^* \Psi_2 + \Psi_4^* \Psi_1).$$

Отриманий вираз (31.24) для густини ймовірності (31.23) є додатною величиною й представляє собою суму густин імовірностей для

чотирьох можливих станів, які характеризуються відповідними функціями  $\Psi_n(\vec{r}, t)$ .

Якщо порівняти вираз (31.24) для  $\vec{j}$  з аналогічним виразом для густини струму ймовірності (12.17), отриманим на основі рівняння Паулі, то побачимо, що формально вираз (31.24), на відміну від (12.17), не залежить від  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  і спіну частинки. Насправді така залежність існує, вона виявляється опосередковано у вигляді залежності функцій  $\Psi_n(\vec{r}, t)$  від цих величин.

### 31.3. Нерелятивістське наближення рівняння Дірака. Спін

Отримаємо нерелятивістське наближення для рівняння Дірака, записаного в біспінорній формі (31.18):

$$\begin{aligned} c\hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \chi(\vec{r}) &= (\varepsilon - m_e c^2 - V(\vec{r})) \phi(\vec{r}); \\ c\hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \phi(\vec{r}) &= (\varepsilon + m_e c^2 - V(\vec{r})) \chi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (31.25)$$

Дослідимо цю систему рівнянь для нерелятивістського руху у випадку малої потенціальної енергії

$$\varepsilon = m_e c^2 + E, \quad |E| \ll m_e c^2, \quad |V(\vec{r})| \ll m_e c^2, \quad (31.26)$$

тоді система набуває вигляду

$$\begin{aligned} c\hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \chi(\vec{r}) &= (E - V(\vec{r})) \phi(\vec{r}); \\ c\hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \phi(\vec{r}) &= (E + 2m_e c^2 - V(\vec{r})) \chi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (31.27)$$

Спочатку проведемо якісний аналіз цієї системи при  $\vec{A} = 0$ . Із другого рівняння системи маємо співвідношення

$$\chi(\vec{r}) \approx \frac{\hat{\sigma} \hat{p}}{2m_e c} \phi(\vec{r}) = \frac{\hat{\sigma} \vec{v}}{2c} \phi(\vec{r}), \quad (31.28)$$

з якого можна отримати оцінку для відношення двох спінорів

$$|\chi(\vec{r})| \approx \frac{|v|}{2c} |\phi(\vec{r})|, \quad |\chi(\vec{r})| \ll |\phi(\vec{r})|, \quad (31.29)$$

згідно з яким у нерелятивістському випадку  $v \ll c$  спінор  $\chi(\vec{r})$  значно менший від  $\varphi(\vec{r})$ .

Проведено детальний аналіз системи (31.27). Для цього виключимо функцію  $\chi(\vec{r})$  з першого рівняння системи (31.7), підставляючи в нього вираз

$$\chi(\vec{r}) = \frac{c}{2m_0c^2(1+(E-V(\vec{r}))/2m_0c^2)} \hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \varphi(\vec{r}) \approx \frac{1}{2m_0c} \hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \varphi(\vec{r}), \quad (31.30)$$

отриманий з другого рівняння системи. Після такої підстановки отримуємо рівняння

$$\frac{1}{2m_e} \hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (31.31)$$

Для спрощення використаємо співвідношення між матрицями Паулі та довільними векторами

$$(\hat{\sigma} \vec{B})(\hat{\sigma} \vec{D}) = \vec{B} \vec{D} + i\hat{\sigma}[\vec{B} \times \vec{D}], \quad (31.32)$$

яке легко довести прямим обчисленням.

Якщо покласти  $\vec{B} = \vec{D} = \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A}$ , то з (31.32) отримуємо

$$\left\{ \hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \right\}^2 \varphi(\vec{r}) = \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 \varphi(\vec{r}) + i\hat{\sigma} \left[ \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \times \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \right] \varphi(\vec{r}).$$

Вираз у квадратних дужках є векторним добутком операторів, він відмінний від нуля внаслідок некомутативності операторів  $\hat{p}$  та  $\vec{A}(\vec{r})$ :

$$\begin{aligned} & \left[ \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \times \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \right] \varphi(\vec{r}) = \\ & = [\hat{p} \times \hat{p}] \varphi(\vec{r}) - \frac{q}{c} [\vec{A} \times \hat{p}] \varphi(\vec{r}) - \frac{q}{c} [\hat{p} \times \vec{A}] \varphi(\vec{r}) + \frac{q^2}{c^2} [\vec{A} \times \vec{A}] \varphi(\vec{r}) = \\ & = -\frac{q}{c} [\vec{A} \times \hat{p}] \varphi(\vec{r}) + i\hbar \frac{q}{c} [(\nabla \varphi(\vec{r})) \times \vec{A}] + i\hbar \frac{q}{c} ([\nabla \times \vec{A}]) \varphi(\vec{r}) = \\ & = -\frac{q}{c} [\vec{A} \times \hat{p}] \varphi(\vec{r}) - i\hbar \frac{q}{c} [\vec{A} \times (\nabla \varphi(\vec{r}))] + i\hbar \frac{q}{c} ([\nabla \times \vec{A}]) \varphi(\vec{r}) = \\ & = -\frac{q}{c} [\vec{A} \times \hat{p}] \varphi(\vec{r}) + \frac{q}{c} [\vec{A} \times \hat{p}] \varphi(\vec{r}) + i\hbar \frac{q}{c} ([\nabla \times \vec{A}]) \varphi(\vec{r}) = i\hbar \frac{q}{c} \vec{H} \varphi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (31.33)$$

Остаточно знаходимо

$$\left\{ \hat{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right) \right\}^2 = \left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{c} \hat{\sigma} \vec{H}. \quad (31.34)$$

Останній доданок у співвідношеннях (31.33) і (31.34) отримано з використанням формули  $\vec{H} = [\nabla \times \vec{A}]$ .

Підставляючи (31.34) у (31.31), отримуємо рівняння

$$\frac{\left( \hat{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_e} \varphi(\vec{r}) - \frac{q\hbar \hat{\sigma} \vec{H}}{2m_e c} \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}), \quad (31.35, a)$$

яке повністю збігається з рівнянням Паулі (12.4) для електрона

$$\left\{ \frac{\left( \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_e} + \frac{e\hbar \hat{\sigma} \vec{H}}{2m_e c} + V(\vec{r}) \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (31.35, б)$$

якщо покласти  $q = -e$ . Другий член у цьому рівнянні відповідає оператору енергії взаємодії

$$\Delta \hat{W}_{\vec{M}_S, \vec{H}} = -(\vec{M}_S \vec{H}) \quad (31.36)$$

магнітного поля  $\vec{H}$  з власним магнітним моментом

$$\vec{M}_S = -\frac{e\hbar}{2m_e c} \hat{\sigma}. \quad (31.37)$$

Якщо використати вираз для гіромагнітного співвідношення  $g = -(e/m_e c)$ , то з (31.37) отримуємо вираз для оператора власного механічного моменту (спіну)

$$\vec{S} = \frac{1}{g} \vec{M}_S = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}. \quad (31.38)$$

Ці вирази повністю збігаються з аналогічними виразами для операторів спіну (11.16) і власного магнітного моменту (11.24), які були введені як феноменологічні величини на основі аналізу експериментів.

Таким чином, рівняння Дірака, яке було побудоване на основі загальних вимог (лоренц-інваріантність, лінійність, невід'ємність густини ймовірності та вимога причинності хвильової функції, яка забезпечується тим, що рівняння еволюції має бути першого порядку відносно

похідної за часом) автоматично привело до поняття спіну та власного магнітного моменту. При цьому дві компоненти верхнього біспінора

$$\varphi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

відповідають двом можливим орієнтаціям спіну нерелятивістського електрона.

Додатковий аналіз показує, що дві компоненти нижнього спінора

$$\chi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$

у випадку  $\varepsilon < 0$ ,  $\varepsilon = -m_e c^2 + E$  характеризують дві орієнтації нерелятивістської античастинки (позитрона). У релятивістському випадку (при  $p \geq m_e c$ ) обидва спінори відмінні від нуля як для частинок, так і для античастинок. У надрелятивістському випадку (при  $p \gg m_e c$ ) ці спінори можуть мати приблизно однакову величину.

Проведений аналіз системи рівнянь (31.27) можна зробити більш точним, якщо врахувати додатковий і малий за величиною вираз  $(E - V(\vec{r}))/2m_0 c^2$ , який розташований у знаменнику формули (31.30). Після деяких перетворень можна отримати уточнений вигляд нерелятивістського наближення рівняння Дірака (аналога рівняння Паулі) (31.35, б):

$$\left\{ \frac{1}{2m_e} \left( \hat{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}) + \frac{e\hbar \hat{\sigma} \vec{H}}{2m_e c} - \frac{\hat{p}^4}{8m_e^2 c^2} - \frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \hat{\sigma}(\nabla V(\vec{r}) \hat{p}) + \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta V(\vec{r}) \right\} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (31.39)$$

Фізичний зміст додаткових складових такий. Доданок, пропорційний  $\hat{p}^4$ , визначає вплив релятивістської зміни маси рухомого електрона і був розглянутий у (30.4) при визначенні впливу "слабкого" релятивізму як збурення. Доданок, який визначається наступним членом і залежить від  $\hat{\sigma}(\nabla V(\vec{r}) \hat{p})$ , можна представити в еквівалентній формі (13.7):

$$\frac{\hbar}{4m_e^2 c^2} \hat{\sigma}(\nabla V(\vec{r}) \hat{p}) = \frac{1}{\mu^2 c^2 r} \frac{dV}{dr} \hat{L} \hat{S} = \frac{Ze^2}{\mu^2 c^2 r^3} \hat{L} \hat{S}.$$

Він визначає спін-орбітальний зв'язок між власним магнітним моментом електрона та магнітним полем, яке утворюється в системі спокою рухомого електрона за рахунок релятивістського перетворення куло-

нівського поля ядра. Останній доданок пропорційний величині  $\Delta V(\vec{r})$ , яка в кулонівському потенціалі ядра визначається з рівняння Пуассона й має вигляд

$$\Delta V(\vec{r}) \equiv \Delta \left( -\frac{Ze^2}{r} \right) = 4\pi Ze^2 \delta(\vec{r}). \quad (31.40)$$

Цей доданок, відмінний від нуля тільки в області атомного ядра, відповідає за так звану *контактну взаємодію* й має вигляд

$$\frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta V(\vec{r}) = \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m_e^2 c^2} \delta(\vec{r}). \quad (31.41)$$

Відповідна йому додаткова енергія

$$E_{\text{конт}} = \int \Psi^+ \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m_e^2 c^2} \delta(\vec{r}) \Psi d^3 r = \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m_e^2 c^2} |\Psi(0)|^2 \quad (31.42)$$

відмінна від нуля тільки для s-станів електрона, для яких  $\Psi(0) \neq 0$ . Виходячи із цього, можна розуміти цю взаємодію, як спін-орбітальний зв'язок для s-станів.

Рівняння Дірака не є специфічним для електрона (позитрона). Воно справедливе для всіх елементарних частинок зі спіном  $S = \hbar/2$ . Зокрема при  $m_e = 0, q = 0$  воно описує нейтрино та антинейтрино. Водночас рівняння Дірака описує властивості нейтрона та протона з похибками. Це пов'язано із самою природою цих частинок, які насправді не є елементарними, а містять у собі періодичне випромінювання та поглинання віртуальних  $\pi$ -мезонів із синхронізованою зміною сумарного (власного, викликаного орбітальним рухом  $\pi$ -мезонів) магнітного моменту, тому їх треба розглядати з використанням теорії сильної взаємодії.

Слід зауважити, що в нерелятивістській теорії вважається, що спін і власний магнітний момент є сталими величинами, які є такими ж невід'ємними характеристиками частинки, як її заряд. У релятивістській теорії це не так. При зростанні енергії частинки її магнітний момент у лабораторній системі зменшується обернено пропорційно лоренц-фактору, а спін залишається незмінним. Формально це випливає з вигляду виразу для гіромагнітного співвідношення, яке при збільшенні енергії частинки змінюється  $g = -(e/m_e c) \rightarrow -(e/\gamma m_e c)$ , що веде до необмеженого зменшення оператора власного механічного моменту

$$\vec{M}_S = g \vec{S} = \frac{e\hbar}{2\gamma m_e c} \hat{\sigma} \Big|_{\gamma \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

Строгий розрахунок приводить до того самого висновку.



**Контрольні запитання**

1. Який зміст біспінорів і спінорів?
2. У якому наближенні з рівняння Дірака можна знайти власний магнітний момент частинки?
3. Як у рівняння Дірака для вільного простору можна вводити векторний і скалярний потенціали?

**Література:** [2], § 61–63.

**Додаткова література:** [IV].

## § 32. Рух частинки Дірака у вільному просторі та в полі ядра

### 32.1. Вільний рух частинки Дірака

Рівняння Дірака для вільного простору (31.11) у покомпонентній формі знаходимо при підстановці явного вигляду матриць Дірака (31.9) і хвильової функції (31.12), воно матиме такий вигляд:

$$\begin{cases} (\varepsilon - m_0c^2)\Psi_1 = c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\Psi_4 + c\hat{p}_z\Psi_3, \\ (\varepsilon - m_0c^2)\Psi_2 = c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\Psi_3 - c\hat{p}_z\Psi_4, \\ (\varepsilon + m_0c^2)\Psi_3 = c(\hat{p}_x - i\hat{p}_y)\Psi_2 + c\hat{p}_z\Psi_1, \\ (\varepsilon + m_0c^2)\Psi_4 = c(\hat{p}_x + i\hat{p}_y)\Psi_1 - c\hat{p}_z\Psi_2. \end{cases} \quad (32.1)$$

Оскільки оператор імпульсу  $\hat{p}$  комутує з оператором Гамільтона  $\hat{H} = (\beta m_0c^2 + c\hat{\alpha}\hat{p})$ , то розв'язок цього рівняння у випадку релятивістського руху частинки в напрямку  $\vec{e}_z$  можна шукати у вигляді станів з певним імпульсом

$$\Psi_n(z) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} u_n(\vec{p}) e^{i\frac{pz}{\hbar}}, \quad \vec{p} = \vec{e}_z p. \quad (32.2)$$

Після підстановки цього розв'язку в систему (31.43) знаходимо два подвійно вироджених розв'язки для енергії частинки

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} = \pm \varepsilon_{\vec{p}}. \quad (32.3)$$

Один із них визначає енергію позитрона, а другий – електрона. Виродження пов'язано з тим, що під час вільного руху енергія не залежить від орієнтації спіну. Якщо підставити значення енергії в систему (31.1) і використати співвідношення (31.18), які для вільного руху мають вигляд

$$\begin{aligned} c\hat{\alpha}\hat{p}\chi(\vec{r}) &= (\varepsilon - m_e c^2)\varphi(\vec{r}), \\ c\hat{\alpha}\hat{p}\varphi(\vec{r}) &= (\varepsilon + m_e c^2)\chi(\vec{r}), \end{aligned} \quad (32.4)$$

то після деяких перетворень отримуємо вирази для хвильових функцій у чотирьох можливих випадках відносно комбінацій енергії частинки (32.3) і напрямку орієнтації її спіну відносно осі квантування  $oz$ :

$$u(\varepsilon = \varepsilon_{\vec{p}}, S_z = \hbar/2) = \sqrt{\frac{m_e c^2 + \varepsilon}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{m_e c^2 + \varepsilon} \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \\ 0 \\ \sqrt{1 - \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (32.5, a)$$

$$u(\varepsilon = \varepsilon_{\vec{p}}, S_z = -\hbar/2) = \sqrt{\frac{m_e c^2 + \varepsilon}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-cp}{m_e c^2 + \varepsilon} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 + \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \\ 0 \\ -\sqrt{1 - \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \end{pmatrix}; \quad (32.5, б)$$

$$u(\varepsilon = -\varepsilon_{\vec{p}}, S_z = \hbar/2) = \sqrt{\frac{m_e c^2 + \varepsilon}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp}{m_e c^2 + \varepsilon} \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \\ 0 \\ \sqrt{1 + \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad (32.5, в)$$

$$u(\varepsilon = -\varepsilon_{\vec{p}}, S_z = -\hbar/2) = \sqrt{\frac{m_e c^2 + \varepsilon}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \frac{-c\vec{p}}{m_e c^2 + \varepsilon} \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{1 - \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \\ 0 \\ \sqrt{1 + \frac{m_e c^2}{|\varepsilon|}} \end{pmatrix}. \quad (32.5, з)$$

Для нерухомих частинок ці самі хвильові функції набувають такого вигляду:

$$u(\varepsilon = \varepsilon_{\vec{p}}, S_z = \hbar/2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad u(\varepsilon = \varepsilon_{\vec{p}}, S_z = -\hbar/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$u(\varepsilon = -\varepsilon_{\vec{p}}, S_z = \hbar/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad u(\varepsilon = -\varepsilon_{\vec{p}}, S_z = -\hbar/2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Видно, що дві перші функції відповідають двом станам електрона, а дві інші - позитрона. Із цих співвідношень видно, що стан частинки при конкретній орієнтації спіну являє собою суперпозицію станів з додатною та від'ємною енергіями. Ці стани, якщо виходити із формули (32.3), розділені енергетичним інтервалом шириною  $\Delta\varepsilon = 2m_e c^2$  (рис. 32.1).

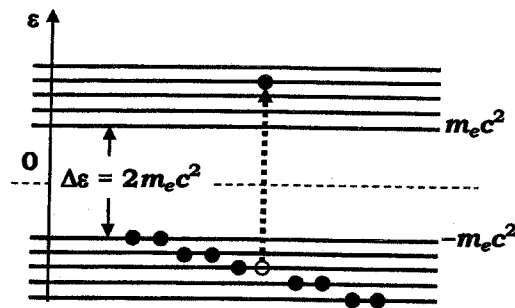


Рис. 32.1. Спектр електронних станів з додатною та від'ємною енергією

Наявність станів з від'ємною енергією викликає багато заперечень. Головне з них полягає в тому, що будь-який електрон буде переходити між дозволеними рівнями, опускаючись все нижче і випромінюючи

необмежену кількість квантів електромагнітного поля. Для того, щоб відкинути таку нереальну можливість, П. Дірак запропонував вважати, що всі стани з від'ємною енергією заповнені електронами й утворюють так зване море Дірака (рис. 32.1), тобто переходи вниз є забороненими. Заряд цих електронів нейтралізований розподіленим стороннім додатним зарядом. Питання про природу цього компенсуючого заряду Дірак не розглядав.

Під час дії на систему зовнішнього збурення (напр., електромагнітного поля з енергією  $E \geq 2m_e c^2$ ) відбувається перехід електрона із заповнених станів на один з вільних. Поява вільного електрона супроводжується появою незаповненого стану в області від'ємних енергій. Оскільки всі стани в цій області нейтралізовані за зарядом, то поява незаповненого стану (фактично - дірки) приводить до появи ефективного об'єкту з позитивним зарядом. Цей об'єкт є позитроном. Обидва утворених об'єкти можуть рухатись (у т. ч., у протилежних напрямках під дією електричного поля). При їх зустрічі можливий зворотний перехід електрона на вільний стан дірки, що буде сприйматися, як анігіляція електрон-позитронної пари з випромінюванням  $\gamma$ -квантів (із закону збереження імпульсу випливає, що квантів має бути, як мінімум, два). Після появи початкової моделі Дірака були запропоновані й інші моделі станів з від'ємною енергією. Серед них є дуже екзотичні. Зокрема, виходячи з вигляду залежної від часу частини стаціонарної хвильової функції  $\Psi_n \sim \exp(-i\varepsilon_n t / \hbar)$ , одна з моделей описує позитрон (тобто частинку з енергією  $\varepsilon_n < 0$ ), як електрон з енергією  $\varepsilon_n > 0$ , який рухається у зворотному напрямку відносно часової осі, тобто з майбутнього в минуле. Доведено, що позитрон є абсолютно реальною частинкою (точніше античастинкою), яка сама по собі є стабільною, а її наявність необхідна для так званої слабкої взаємодії в ядерних перетвореннях.

Із формул (31.47) випливає, що співвідношення між електронним і позитронним станами частинки залежить від її енергії - за малої енергії реалізується тільки електронний (або тільки позитронний) стан, а за великої, їх амплітуди стають однаковими.

## 32.2. Рух діраківського електрона в полі ядра

Рівняння Шредінгера, яке використовувалось для обчислення спектра рівнів енергії в різних атомах, є нерелятивістським. Для легких ядер, коли середньоквадратична швидкість електрона відносно мала

$$\sqrt{\langle v_{\text{нереа}}^2 \rangle} = Z_{\text{еф}} e^2 / \hbar \approx 2,4 Z_{\text{еф}} 10^8 \text{ см/с} \ll c, \quad (32.6)$$

такий опис є коректним. У цій формулі  $Z_{\text{еф}}$  – ефективний заряд екранованого ядра (для водневоподібного атома  $Z_{\text{еф}} = Z$ ).

Однак для ядер з  $Z \geq 50 - 100$  швидкість електронів стає близькою до швидкості світла, тому для обчислення спектра рівнів енергії необхідно використовувати стаціонарне рівняння Дірака (31.25). Із цього рівняння у випадку представлення енергії взаємодії електрона з ядром у вигляді звичайного кулонівського неекранованого потенціалу  $V(r) = -Ze^2/r$  після громіздких обчислень задачі про власні значення та власні функції випливає, що спектр дозволених рівнів енергії характеризується розв'язком

$$E_{nj} = m_e c^2 \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{[n - (j+1/2) + \sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2 Z^2}]^2}}} - 1 \right\}, \quad (32.7)$$

який тільки при  $Z \ll 1/\alpha = \hbar c / e^2 \approx 137$  перетворюється на формулу Бальмера, а з урахуванням електронного екранування кулонівського поля ядра – на закон Мозлі, де  $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$  – стала тонкої структури,  $n$  – головне квантове число,  $j = |l \pm 1/2|$  – квантове число для сумарного (сума орбітального та спінового) моменту електрона.

Розв'язок (32.7) має свою особливість. Якщо врахувати, що мінімальне значення квантового числа  $j_{\text{min}} = 1/2$  для сумарного моменту  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  відповідає рівному нулю орбітальному квантовому числу  $l = 0$  і визначається тільки спіном  $\vec{S}$ , то при  $Z > 1/\alpha \approx 137$  і при  $j_{\text{min}} = 1/2$  вираз для енергії стає комплексним. Такий результат визначає поріг нестійкості  $Z_{\text{кр}} \approx 137$  класичної моделі атома Резерфорда (тобто системи, у якій навколо ядра рухається конкретний розглядуваний електрон) і приводить до можливості народження електрон-позитронних пар.

Якщо розглядати задачу з реальним неточковим (об'ємним) ядром з радіусом  $R \approx 1,3 \cdot 10^{-13} A^{1/3}$  см, то обмеження  $Z < Z_{\text{кр}} \approx 137$  знімається, але й у цьому разі є інша верхня межа  $Z_{\text{кр}} \approx 170$  існування стійкого атома у формі планетарної електрон-ядерної системи, яка склада-

ється з  $Z$  протонів,  $A - Z$  нейтронів,  $Z$  електронів. При  $Z > Z_{\text{кр}}$  одностинкове рівняння Дірака втрачає зміст, тому необхідно розглядати багаточастинкову задачу з урахуванням можливості народження електрон-позитронних пар і появи нових рівнів енергії електронів, які не враховуються наведеним розв'язком (32.7).

Необхідно зазначити, що термін *нестійкість* стосується не самого факту існування надважких атомів, а лише застосування класичної моделі атома для ядер з дуже великим зарядом. Сам по собі атом з  $Z > Z_{\text{кр}}$  буде стійким і стаціонарним, однак спектр рівнів буде істотно відмінним від (32.7).

### Контрольні запитання

1. За яких умов амплітуди біспінорів можуть стати однаковими, а коли вони різко відмінні?
2. Який граничний заряд може мати стійкий атом із фіксованою кількістю електронів і позитронів з точковим ядром і ядром скінченного розміру?
3. Чи можна застосовувати одностинкове наближення при розрахунку атомів з дуже великим зарядом ядра?

**Література:** [2], § 65–69.

**Додаткова література:** [IV].

## Розділ XII

### ВИБРАНІ ПРИКЛАДНІ ЗАДАЧІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ

#### § 33. Кореляція інтенсивностей хвиль де Бройля і тривимірна локація просторового положення джерела мікрочастинок

Реальність існування хвиль де Бройля, які відповідають руху матеріальних тіл, може бути використаною при створенні систем просторової (тривимірної або двовимірної) локації джерел іонізуючого випромінювання та ядерних частинок (зокрема нейтрино або нейтронів). До таких задач належить, наприклад, пошук джерел іонізуючого випромінювання, які невідомим чином розташовані в просторі. Подібні задачі нерідко виникають у прикладній фізиці та прикладній дозиметрії. Аналогічні проблеми виникають і в астрофізиці при дослідженні локальних імпульсних радіаційних процесів (зокрема т. зв. *гамма-спалахів*, які найімовірніше виникають при *гравітаційному колапсі* надважких зірок, що веде до утворення *нейтронних зірок* і *чорних дірок*), продукти яких невидимі в оптичному та мікрохвильовому діапазонах довжин хвиль.

Якщо ядерні процеси в джерелі іонізуючого випромінювання супроводжуються м'яким електромагнітним випромінюванням, то відновити положення цього джерела інколи можна за допомогою різних фазово-інтерференційних методів, які базуються на дослідженні різ-

ниці фаз сигналів з різних приймачів електромагнітних хвиль. Це добре відомий метод інтерференції амплітуд хвиль.

Зовсім інша ситуація буде в тому випадку, коли електромагнітні сигнали дуже слабкі й маскуються електромагнітними завадами або взагалі відсутні, а єдиним джерелом інформації є ядерні частинки, які вилітають із джерела випромінювання. Традиційний метод реєстрації ядерних частинок полягає у використанні віддалених лічильників, які фіксують послідовність вторинних імпульсних процесів (поява фотоелектронів, спалах світла, імпульс струму тощо), які супроводжують послідовність проходження мікрочастинок через детектор. На перший погляд здається, що за допомогою таких лічильників неможливо відновити просторовий розподіл джерел випромінювання. Однак детальний аналіз показує, що таке відновлення можна здійснити, якщо врахувати хвильові властивості мікрочастинок і використати метод інтерференції інтенсивностей для частинок, стан яких описується хвилями де Бройля [VII]. Розглянемо цей метод.

Рух кожної з ядерних мікрочастинок, що вилітають із джерела, на відстані, яка значно перевищує розмір джерела, описується нормованою сферичною хвильовою функцією. Якби процес випромінювання тривав нескінченно довго, то хвильова функція мала б вигляд монохроматичної сферичної хвилі на зразок (27.5):

$$\Psi(\vec{r}, t) = f(\theta) \frac{e^{-i\{(Et - \vec{p}\vec{r})/\hbar + \varphi\}}}{r\sqrt{4\pi}}. \quad (33.1)$$

У (33.1) величини  $E, \vec{p}, \varphi_n$  – відповідно, енергія, імпульс частинки та початкова фаза хвильової функції.

Оскільки процес генерації кожної частинки є порівняно коротким, то хвильова функція відмінна від монохроматичної й має вигляд

$$\Psi(\vec{r}, t) = f(\theta) \frac{F(\vec{r}, t)e^{-i\varphi}}{r\sqrt{4\pi}}, \quad (33.2)$$

де величина  $f(\theta)$  характеризує кутовий розподіл вильоту частинок. Для ізотропних джерел випромінювання ця величина є константою  $f(\theta) = f_0$ .

Розглянемо випадок, коли всі частинки мають однакові характеристики (енергію та імпульс). Процес детектування цих частинок здійснюється двома просторово рознесеними детекторами  $j$  та  $i$  (рис. 33.1).

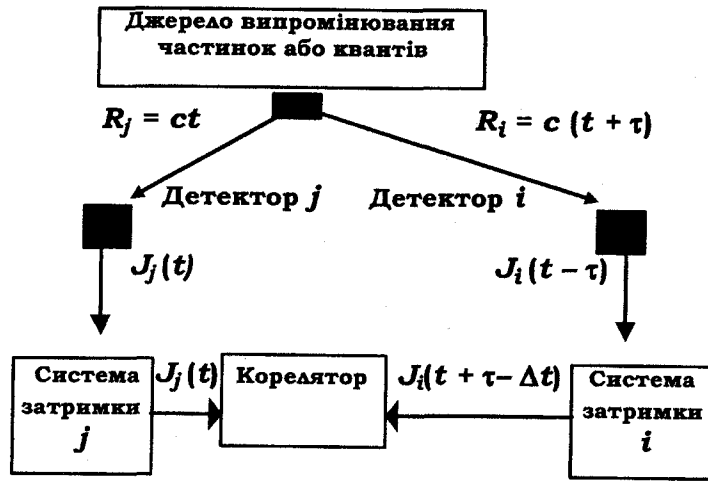


Рис. 33.1. Схема інтерферометра інтенсивностей хвиль де Бройля для просторової локації джерела мікрочастинок

Імпульсній послідовності частинок, які потрапляють у детектор  $j$  у випадкові моменти часу  $t_{jn}$ , відповідає повна хвильова функція

$$\xi_j(t) = \sum_n \Psi(\vec{R}_j, t - t_{jn}) = \sum_n f_0 \frac{F(R_j, t - t_{jn})}{\sqrt{4\pi R_j}} e^{-i\varphi_n}. \quad (33.3)$$

Інтенсивність сигналу (фактично – послідовність імпульсів електричного струму), який реєструється цим детектором, визначається співвідношенням

$$J_j(t) = \varepsilon_j |\xi_j(t)|^2, \quad (33.4)$$

у якому величина  $|\xi_j(t)|^2$  характеризує інтенсивність потоку частинок від досліджуваного джерела в місці розташування детектора  $j$ ,  $\varepsilon_j$  – ефективність реєстрації частинки в детекторі, яка залежить як від імовірності потрапляння частинки в детектор, так і від квантової ефективності детектора щодо перетворення процесу взаємодії частинки з детектором на електричний сигнал.

Аналогічна імпульсна послідовність частинок, що реєструються в місці розташування детектора  $i$ , та інтенсивність сигналу від нього визначаються формулами:

$$\xi_i(t - \tau) = \sum_n \Psi(\vec{R}_i, t - t_{in} - \tau) = \sum_n f_0 \frac{F(R_i, t - t_{in} - \tau)}{\sqrt{4\pi R_i}} e^{-i\varphi_n}, \quad (33.5)$$

$$J_i(t - \tau) = \varepsilon_i |\xi_i(t - \tau)|^2. \quad (33.6)$$

Запізнення сигналу в другому детекторі на величину  $\tau$  викликане тим, що джерело випромінювання розташоване несиметрично щодо обох детекторів.

Імпульси електричного струму від обох детекторів надходять на систему корелятора, який їх перемножує та усереднює. Спочатку розглянемо роботу системи кореляції інтенсивностей без урахування впливу систем затримки сигналу. Кореляційна функція інтенсивностей  $J_j(t)$  і  $J_i(t - \tau)$  на виході корелятора має вигляд

$$K_J(\tau) = \langle J_j(t) J_i(t - \tau) \rangle - \langle J_j(t) \rangle \langle J_i(t - \tau) \rangle = \varepsilon_j \varepsilon_i \langle \xi_j(t) \xi_j^*(t) \xi_i(t - \tau) \xi_i^*(t - \tau) \rangle - \langle J_j(t) \rangle \langle J_i(t - \tau) \rangle \quad (33.7)$$

і залежить від початкового моменту четвертого порядку випадкової величини  $\xi_\alpha(t)$ .

Процес спонтанного розпаду джерел радіоактивних частинок є нормальним гауссовим процесом. Для нього початкові парні моменти вищих порядків випадкових величин зводяться до всіх можливих комбінацій початкових моментів другого порядку незалежно від порядку розташування величин у кожному із цих моментів

$$\langle x_i x_j x_k x_l \rangle = \sum_{i \neq j \neq k \neq l} \langle x_i x_j \rangle \langle x_k x_l \rangle. \quad (33.8)$$

Використовуючи це правило, приведемо (33.7) до вигляду

$$K_J(\tau) = \varepsilon_j \varepsilon_i \{ \langle \xi_j(t) \xi_j^*(t) \rangle \langle \xi_i(t - \tau) \xi_i^*(t - \tau) \rangle + \langle \xi_j(t) \xi_i(t - \tau) \rangle \langle \xi_j^*(t) \xi_i^*(t - \tau) \rangle + \langle \xi_j(t) \xi_i^*(t - \tau) \rangle \langle \xi_j^*(t) \xi_i(t - \tau) \rangle \} - \langle J_j(t) \rangle \langle J_i(t - \tau) \rangle. \quad (33.9)$$

Середні значення від добутку функцій, які не є взаємно комплексноспряженими, дорівнюють нулю

$$\langle \xi_j(t) \xi_i(t - \tau) \rangle = 0, \quad \langle \xi_j^*(t) \xi_i^*(t - \tau) \rangle = 0. \quad (33.10)$$

Для доведення досить використати явний вигляд функцій (33.3) та (33.5) і врахувати процедуру усереднення за випадковою фазою. Кожний з моментів (33.10) пропорційний величинам  $\langle e^{\pm i(\varphi_n + \varphi_m)} \rangle_{\varphi_n, \varphi_m}$ , які для випадкової рівномірно розподіленої фази дорівнюють нулю

$$\langle e^{\pm i(\varphi_n + \varphi_m)} \rangle_{\varphi_n, \varphi_m} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{\pm i(\varphi_n + \varphi_m)} d\varphi_n d\varphi_m = 0. \quad (33.11)$$

Беручи до уваги, що

$$\varepsilon_j \xi_j(t) \xi_j^*(t) = J_j(t), \quad \varepsilon_i \xi_i(t-\tau) \xi_i^*(t-\tau) = J_i(t-\tau); \quad (33.12)$$

$$\varepsilon_j \langle \xi_j(t) \xi_j^*(t) \rangle = \varepsilon_i \langle \xi_i(t-\tau) \xi_i^*(t-\tau) \rangle = \langle J_j(t) \rangle = \langle J_i(t-\tau) \rangle,$$

знаходимо остаточний вираз для кореляційної функції

$$K_J(\tau) = \varepsilon_j \varepsilon_i \langle \xi_j(t) \xi_i^*(t-\tau) \rangle^2 = \varepsilon_j \varepsilon_i \left| \sum_n \Psi(R_j, t-t_{jn}) \Psi^*(\bar{R}_i, t-t_{in}-\tau) \right|^2. \quad (33.13)$$

Для стаціонарних процесів, які відповідають випадковим імпульсним послідовностям (33.3) і (33.5), центральний момент другого порядку  $\langle \xi_j(t) \xi_i^*(t-\tau) \rangle$  у (33.12) визначається виразом

$$\begin{aligned} \langle \xi_j(t) \xi_i^*(t-\tau) \rangle &= \langle n \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(R_j, t) \Psi^*(\bar{R}_i, t-\tau) dt = \\ &= \langle n \rangle \frac{|f_0|^2}{4\pi R_j R_i} \int_{-\infty}^{\infty} F(R_j, t) F^*(R_i, t-\tau) dt, \end{aligned} \quad (33.14)$$

у якому  $\langle n \rangle$  є середньою частотою генерації частинок у джерелі випромінювання (кількість частинок, які генеруються за одиницю часу). Використовуючи формулу (33.14), знаходимо вираз для кореляційної функції (33.13)

$$\begin{aligned} K_J(\tau) &= \langle n_j \rangle \langle n_i \rangle \left| \int_{-\infty}^{\infty} F(R_j, t) F^*(R_i, t-\tau) dt \right|^2, \\ \langle n_k \rangle &= \langle n \rangle \frac{\varepsilon_k |f_0|^2}{4\pi R_k^2} \sigma_k. \end{aligned} \quad (33.15)$$

У (33.15) величина  $\langle n_k \rangle$  є середньою частотою реєстрації частинок  $k$ -м детектором,  $\sigma_k$  – геометричний переріз  $k$ -го детектора. Величина сигналу на виході корелятора визначається кореляційно, функцією (33.15).

Функції  $F(R_j, t)$  і  $F^*(R_i, t-\tau)$ , що визначають (33.15), є комплексними знакозмінними функціями. Залежно від просторового положення джерела частинок відносно детекторів, а також від величини додаткового запізнення  $\tau$  на шляху до різних детекторів, вихідний сигнал (33.15) буде змінюватись. Якщо в одне із плечей інтерферометра інтенсивностей ввести схему затримки електричного сигналу, то при оптимальній величині затримки  $\Delta t = -\tau$  функція (33.15) досягне максимального значення

$$K_J(0) = \langle n_j \rangle \langle n_i \rangle \left| \int_{-\infty}^{\infty} |F(R_j, t)|^2 dt \right|^2. \quad (33.16)$$

Величина цієї затримки дозволяє визначити різницю відстаней від джерела до детекторів і розробити схему просторової локації положення джерела випромінювання.

У системі координат, де положення двох детекторів характеризується величинами  $\bar{r}_j = \{x_j, 0\}$ ,  $\bar{r}_i = \{x_i, 0\}$ , координата джерела випромінювання частинок визначається рівнянням лінії на горизонтальній площині  $z = 0$ :

$$\sqrt{(x_j - x)^2 + y^2} + v\tau = \sqrt{(x_i - x)^2 + y^2}. \quad (33.17)$$

Для визначення точного положення джерела мікрочастинок на площині  $z = 0$  необхідно використати ще один детектор, розташований, наприклад, у точці  $\bar{r}_k = \{x_k, 0\}$ . При цьому координати джерела  $\bar{r} = \{x, y\}$  визначаються як сумісний розв'язок системи з двох довільних рівнянь зі складу повної системи

$$\sqrt{(x_j - x)^2 + y^2} + v\tau_{ji} = \sqrt{(x_i - x)^2 + y^2}, \quad (33.18, a)$$

$$\sqrt{(x_j - x)^2 + y^2} + v\tau_{jk} = \sqrt{(x_k - x)^2 + y^2}, \quad (33.18, б)$$

$$\sqrt{(x_i - x)^2 + y^2} + v\tau_{ik} = \sqrt{(x_k - x)^2 + y^2}. \quad (33.18, в)$$

У цих рівняннях  $\tau_{\alpha\beta}$  – запізнення частинок на шляху від джерела щодо детекторів  $\alpha$  та  $\beta$ .

У випадку тривимірного детектування необхідно використати чотири детектори, положення джерела  $\bar{r} = \{x, y, z\}$  визначатиметься як сумісний розв'язок системи рівнянь:

$$\sqrt{(x_\alpha - x)^2 + (y_\alpha - y)^2 + (z_\alpha - z)^2} + v\tau_{\alpha\beta} = \sqrt{(x_\beta - x)^2 + (y_\beta - y)^2 + (z_\beta - z)^2}, \quad (33.19)$$

$$\alpha \neq \beta = 1, 2, 3, 4,$$

кожне з яких є рівнянням поверхні. Проаналізуємо характеристики такої системи.

Розкладемо випадкові функції  $F(R_j, t)$  та  $F^*(R_i, t-\tau)$  із формули (33.15) в інтеграли Фур'є:

$$F(R_j, t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(R_j, \omega_j) e^{i\omega_j t} d\omega_j, \quad (33.20)$$

$$F^*(R_i, t - \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} F^*(R_i, \omega_i) e^{-i\omega_i(t-\tau)} d\omega_i$$

і підставимо їх у (33.15), отримавши рівняння

$$K_J(\tau) = \langle n_j \rangle \langle n_i \rangle \left| \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(R_j, \omega_j) F^*(R_i, \omega_i) e^{i(\omega_j - \omega_i)t} e^{i\omega_i \tau} d\omega_j d\omega_i dt \right|^2.$$

Це рівняння можна спростити, використовуючи співвідношення

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega_j - \omega_i)t} dt = \delta(\omega_j - \omega_i), \quad (33.21)$$

після чого вираз для кореляційної функції набуває вигляду

$$K_J(\tau) = \langle n_j \rangle \langle n_i \rangle (2\pi)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} F(R_j, \omega) F^*(R_i, \omega) e^{i\omega \tau} d\omega \right|^2. \quad (33.22)$$

Фактично цей результат є певним узагальненням теореми Вінера – Хінчина про зв'язок спектра випадкового процесу з кореляційною функцією на випадок інтерференції інтенсивностей. Вираз (33.22) можна зробити більш конкретним, якщо врахувати особливості електронних систем обробки даних.

Зазвичай сигнали з детекторів ядерних частинок мають типову тривалість  $\delta t \leq 10^{-8}$  с (такою є, напр., тривалість імпульсів, які реєструються фотоелектронним підсилювачем). Ширина спектра такого імпульсу відповідає величині  $\delta\omega \approx 2\pi/\delta t \approx 10^9$  с<sup>-1</sup>.

З урахуванням того, що електронна схема обробки радіотехнічних сигналів зазвичай характеризується смугою пропускання  $\Delta\omega \leq 10^7 - 10^8$  с<sup>-1</sup>, можна вважати, що спектральна смуга сигналів від детекторів  $F(R_j, \omega)$  і  $F^*(R_i, \omega)$  є набагато більшою, ніж смуга пропускання електронної схеми обробки сигналів. Унаслідок цього при простому аналізі можна вважати, що спектральна густина сигналів, які пропускаються цією схемою, є постійною величиною, що дорівнює  $F(R_j, 0)$  і  $F^*(R_i, 0)$ . Із виразу (33.22) отримуємо спрощене співвідношення

$$K_J(\tau) = \langle n_j \rangle \langle n_i \rangle (2\pi)^2 \left| \int_{-\Delta\omega/2}^{\Delta\omega/2} F(R_j, \omega) F^*(R_i, \omega) e^{i\omega \tau} d\omega \right|^2 \approx$$

$$\approx \langle n_j \rangle \langle n_i \rangle (2\pi)^2 |F(R_j, 0) F^*(R_i, 0)|^2 \left\{ \frac{\sin(\Delta\omega \tau / 2)}{\tau / 2} \right\}^2. \quad (33.23)$$

Цю функцію зображено на рис. 33.2.

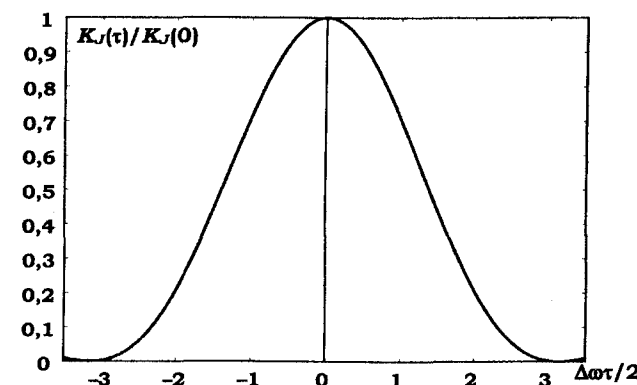


Рис. 33.2. Залежність нормованої кореляційної функції  $K_J(\tau)$  від часу запізнення  $\tau$  і смуги пропускання  $\Delta\omega$  системи електронної обробки даних інтерферометра інтенсивностей

Із виразу (33.23) випливає, що можливість застосування методу кореляції інтенсивностей (і пов'язана з ним можливість визначення положення джерела мікрочастинок) обмежена областю можливих затримок імпульсів  $\tau_{\max} = \pi/\Delta\omega \approx 3 \cdot (10^{-7} - 10^{-8})$  с, що відповідає максимально можливій різниці шляхів від детекторів до джерела  $\Delta R_{\max} = v\tau_{\max}$ . При реєстрації нейтрино, для яких  $v = c$ , ця величина дорівнює  $\Delta R_{\max} = c\tau_{\max} = 100 - 10$  м. При зменшенні смуги пропускання електронних пристроїв  $\Delta\omega$  можливе відповідне збільшення  $\Delta R_{\max}$ . За допомогою даного методу можлива просторова локація та аналіз різних джерел радіоактивного випромінювання (зокрема аналіз роботи ядерного реактора в аварійних умовах [VII]).

З аналізу співвідношень (33.17) – (33.19) і (33.23) випливає, що максимальна відстань до досліджуваного джерела випромінювання та відносна похибка у вимірюванні цієї відстані рівні:

$$L_{\max} \approx a^2 \Delta\omega / 4c\sqrt{\delta}, \quad \Delta L / L \approx c\sqrt{\delta} / a\Delta\omega, \quad (33.24)$$

де  $a$  – відстань між двома детекторами,  $\delta = |K(0) - K(\tau_{\min})| / K(0)$  – відносна точність вимірювання кореляційної функції біля її максимального значення  $K(0)$ ,  $\tau_{\min} = a^2 / 2L_{\max}c$ .

Прості оцінки показують, що, наприклад, при  $a = 10$  м і реальних значеннях  $\delta \approx 10^{-4}$  та  $\Delta\omega = 10^8 \text{ с}^{-1}$  можлива реалізація таких параметрів системи:  $L_{\max} \approx 1000$  м,  $\Delta L \approx 3$  м,  $\Delta L / L \approx 0,3\%$ .

При збільшенні відстані між детекторами до величини  $a \approx 10^4$  км (це відповідає розташуванню швидкодійчих зв'язаних детекторів у різних частинах Землі) і при використанні широкосмутових електронних пристроїв з  $\Delta\omega \approx 10^9 \text{ с}^{-1}$  (або відповідних швидкодійчих систем цифрової обробки інформації) розглянута система може досліджувати просторове положення джерел випромінювання, розташованих на відстані до  $L_{\max} \approx 10^{13}$  км, з точністю до  $\Delta L / L \approx 10^{-9}$ . Слід зазначити, що ключова умова при проведенні таких досліджень (особливо в масштабі реального часу) пов'язана з необхідністю швидкої реєстрації детекторами великої кількості імпульсів від досліджуваного джерела випромінювання.

*Додаткова література:* [VII].

## § 34. Ефект Доплера для швидкого джерела випромінювання за екстремальної умови Вавилова – Черенкова з урахуванням частоти та імпульсу фотона

### 34.1. Кінематичний ефект Доплера

Ефект Доплера, який визначає залежність частоти випромінювання від швидкості та напрямку руху джерела цього випромінювання  $\nu$ , належить до найважливіших явищ фізики. Уперше він був обґрунтований (у найпростішій формі) у 1842 р., а в остаточному вигляді був визначений А. Ейнштейном у 1905 р. Важко переоцінити

його значення та області застосування – від земних прискорювачів і релятивістської астрофізики (для яких  $\nu/c \rightarrow 1$ ) до ефекту Месбауера, для якого  $\nu/c \leq 10^{-12}$ .

У найбільш універсальній формі ефект Доплера описується формулою

$$\omega = \frac{\Omega_0}{\gamma(1 - \beta n(\omega) \cos \theta)}, \quad (34.1)$$

яка пов'язує частоту  $\omega$  хвилі в лабораторній (нерухомій) системі координат із частотою  $\Omega_0$ , яка відповідає хвилі в системі, що рухається зі швидкістю  $\vec{\beta} = \vec{v}/c$ . Тут  $n(\omega)$  – показник заломлення нерухомого оточуючого середовища;  $\theta$  – кут, який характеризує напрямок хвильового вектора випромінювання  $\vec{k}$  у лабораторній системі відносно напрямку вектора швидкості руху  $\vec{v}$  супутньої системи,  $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$ . Ця формула впливає з простих кінематичних співвідношень, а її зміст полягає у визначенні зміни частоти випромінювання при переході в іншу інерційну систему. При такому тлумаченні дана формула буде справедливою й не приведе до непорозумінь у всьому інтервалі параметрів. З іншого боку, для практичного користування більш корисним є співвідношення типу (34.1) із заміною  $\Omega_0 \rightarrow \Omega_{21}$ , яке пов'язує частоту хвилі  $\omega$  у лабораторній системі координат із частотою переходу  $\Omega_{21}$  між двома дискретними рівнями енергії  $\varepsilon_2$  і  $\varepsilon_1$  частинки, яка рухається зі швидкістю  $\vec{v}$ .

Формально різниця полягає лише в заміні  $\Omega_0 \rightarrow \Omega_{21}$ . Відмінність полягає в питанні про коректне врахування імпульсу фотона (у першому випадку його враховувати не потрібно, а в другому – потрібно). За малої частоти переходу (коли можна знехтувати ефектом віддачі при випромінюванні або поглинанні) допустиме ототожнення  $\Omega_0$  та  $\Omega_{21}$  у (34.1).

Інший вигляд матиме випадок для високої частоти. Зокрема із формули (34.1) з урахуванням заміни  $\Omega_0 = \Omega_{21}$  впливає парадоксальний результат – при формальному виконанні умови  $\beta n(\omega) \cos \theta = 1$ , яка пов'язує швидкість частинки, дисперсію середовища та напрямок випромінювання, частота випромінювання стає нескінченно великою при обмеженій частоті  $\Omega_{21}$ . Очевидно, що цей нефізичний результат зумовлений нехтуванням ефекту віддачі при поглинанні та випромінюванні фотонів. Виявляється, що в межах критичного інтервалу па-



раметрів  $\Delta(\beta, \omega, \theta)$ , який лежить близько до екстремальної умови  $\beta n(\omega) \cos \theta = 1$ , закони перетворення спектрів і частот випромінювання та поглинання взагалі не були досліджені. Однак у межах цього інтервалу внаслідок впливу ефекту віддачі має спостерігатись дуже сильна залежність обох частот від параметрів середовища і характеристик руху. Цей вплив досліджується далі.

### 34.2. Особливості ефекту Доплера в області екстремальних параметрів

Очевидно, що суто кінематичні перетворення частоти, які не враховують динаміки процесів і корпускулярні властивості фотонів, загалом є некоректними, що в екстремальних умовах може приводити до дуже грубих помилок. Коректні результати можна отримати тільки при сумісному використанні кінематичних перетворень і законів збереження енергії та імпульсу. Очевидність такого підходу випливає з того факту, що зростання частоти та енергії випромінювання при наближенні до границі  $\beta n(\omega) \cos \theta = 1$  невідворотно призводить до різкого зростання імпульсу фотона (а отже, й енергії віддачі), який діє на випромінювальну та поглинальну системи й змінює властивості самих систем. У таких умовах вплив віддачі не може бути коректно врахований за допомогою теорії збурень, а вимагає точного розрахунку на основі законів збереження.

Розглянемо процес випромінювання фотона із частотою  $\omega_{rad}$  та імпульсом  $\hbar \vec{k}$  частинкою, яка має масу  $m$ , два рівні енергії внутрішнього руху – початковий (верхній)  $\varepsilon_2$  і кінцевий (нижній)  $\varepsilon_1$  (причому  $mc^2 \gg \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ ), і початковий імпульс  $\vec{p}$ . Цей процес відповідає законам збереження енергії та імпульсу:

$$\sqrt{p^2 c^2 + (mc^2 + \varepsilon_2)^2} - \sqrt{(\vec{p} - \Delta \vec{p})^2 c^2 + (mc^2 + \varepsilon_1)^2} = \hbar \omega_{rad}; \quad (34.2)$$

$$\Delta \vec{p} = \hbar \vec{k}; \quad \vec{k} = \vec{e}_k n \omega_{rad} / c; \quad n \equiv n(\omega_{rad}).$$

Виключаючи із закону збереження енергії у формулі (34.2) імпульс фотона  $\Delta \vec{p}$  і проводячи процедуру лінеаризації отриманого виразу за рахунок введення ефективних рівнів енергії  $\varepsilon_{1,2}^*$ :

$$\varepsilon_{1,2}^* = \varepsilon_{1,2} (1 + \varepsilon_{1,2} / 2mc^2), \quad (34.3)$$

отримаємо

$$\hbar \omega_{rad} = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4 + 2mc^2 \varepsilon_2^*} - \sqrt{[p - \hbar(\omega_{rad} / c) n \cos \theta]^2 c^2 + [n \hbar(\omega_{rad} / c) \sin \theta]^2 c^2 + m^2 c^4 + 2mc^2 \varepsilon_1^*}. \quad (34.4)$$

Отримане рівняння має точний розв'язок

$$\omega_{rad} = \frac{\gamma mc^2}{\hbar(n^2 - 1)} \left[ \pm \sqrt{(1 - \beta n \cos \theta)^2 + 2 \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1) - (1 - \beta n \cos \theta)} \right], \quad (34.5)$$

справедливий також і за екстремальної умови  $(1 - \beta n(\omega) \cos \theta) = 0$ .

Слід зауважити, що загальний розв'язок (34.5), незважаючи на простоту його отримання, був знайдений лише в останні роки [VIII, IX].

Аналізуючи (34.5), необхідно виходити з двох очевидних умов:

а) частота випромінювання  $\omega_{rad}$  і частота поглинання  $\omega_{abs}$  (її розглянемо далі) мають бути додатними величинами;

б) має виконуватись умова граничного переходу: при зменшенні швидкості частинки через зменшення впливу ефекту віддачі частоти випромінювання та поглинання мають бути обмежені частотою переходу

$$(\omega_{rad}, \omega_{abs})_{\beta \rightarrow 0} \rightarrow |\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*| / \hbar. \quad (34.6)$$

Ці умови разом з розв'язком (34.5) визначають направленість переходів між рівнями енергії  $\varepsilon_2^*$  та  $\varepsilon_1^*$  у частинці, яка рухається.

Розглянемо всі можливі комбінації параметрів задачі. Результати подальшого аналізу розв'язку представлено на рис. 34.1. У тому випадку, коли  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta > 0$ , рівняння (34.5) набуває вигляду

$$\omega_{rad} = \frac{\gamma mc^2}{\hbar(n^2 - 1)} \left[ \sqrt{(1 - \beta n \cos \theta)^2 + 2 \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1) - (1 - \beta n \cos \theta)} \right]. \quad (34.7)$$

Із розв'язку (34.7) випливає, що в даному випадку наявність випромінювання із частотою  $\omega_{rad} \geq 0$  буде можливою лише за виконання додаткової умови

$$\frac{(\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1) > 0. \quad (34.8)$$

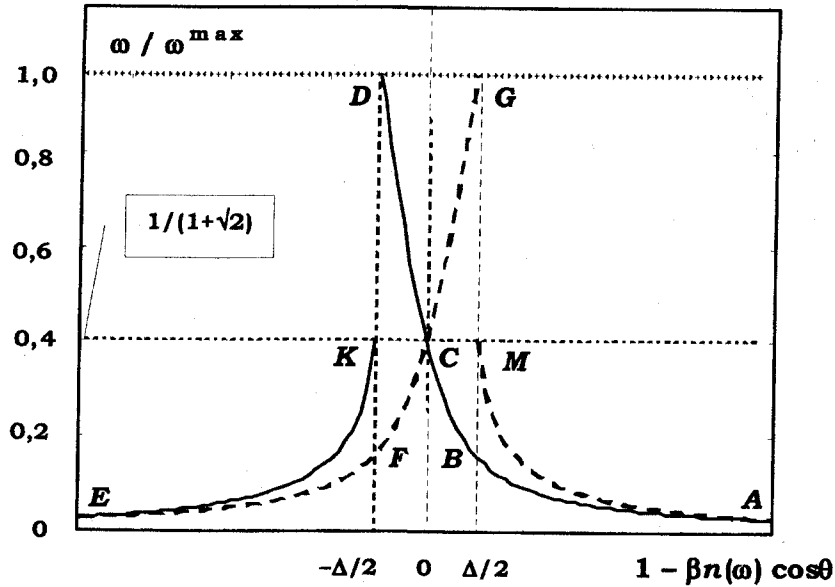


Рис. 34.1. Залежність частоти поглинання (гілки AM, GE) і випромінювання (AD, KE) для області нормального (AM, AD) та аномального (GE, KE) ефекту Доплера. Величина Δ характеризує мінімальний інтервал параметрів, де формула Доплера у стандартній формі (34.1) свідомо неправдива

Характер випромінювання залежатиме від абсолютного значення величини  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta$ . Зокрема із формули (34.7) за умови

$$(1 - \beta n \cos \theta)^2 \gg 2 \frac{|\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*|}{\gamma^2 mc^2} |n^2 - 1| \quad (34.9)$$

(тобто для параметрів, які далекі від критичної умови  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta \rightarrow +0$ ), маємо

$$\omega_{rad} \approx \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma \hbar (1 - \beta n \cos \theta)} \left[ 1 - \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)(n^2 - 1)}{2\gamma^2 mc^2 (1 - \beta n \cos \theta)^2} \right] \approx \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma \hbar (1 - \beta n \cos \theta)}. \quad (34.10)$$

Цей результат відрізняється від наближеного співвідношення (34.2) лише малими поправками  $\varepsilon_s^2 / mc^2 \ll 1$  і відповідає точці A на гілці AB на рис. 34.1.

У другому граничному випадку

$$(1 - \beta n \cos \theta)^2 \ll 2 \frac{|\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*|}{\gamma^2 mc^2} |n^2 - 1|. \quad (34.11)$$

Із (34.7) випливає принципово інший результат

$$\omega_{rad} \approx \sqrt{2 \frac{mc^2 (\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)}{(n^2 - 1) \hbar^2} \left[ 1 + \frac{(1 - \beta n \cos \theta)^2 \gamma^2 mc^2}{4(\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)(n^2 - 1)} \right]} \approx \sqrt{2 \frac{mc^2 (\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)}{(n^2 - 1) \hbar^2}}. \quad (34.12)$$

Він відповідає точці C на гілці BC. Із (34.12), зокрема, випливає, що при виконанні як (34.11), так і розглянутої вище критичної умови  $(1 - \beta n(\omega) \cos \theta) \rightarrow +0$  частота випромінювання взагалі не залежить від повної енергії частинки  $\gamma mc^2$  і від кута  $\theta$ . Зазначимо, що опосередкована залежність частоти від кута  $\theta$  залишається. Це випливає з того, що результат (34.12) існує тільки за виконання умови (34.10), яка справедлива лише при  $\theta \rightarrow 0$ . Зауважимо також, що результат (34.12) принципово відрізняється від випромінювання у вільному просторі, для якого при  $1 - \beta \cos \theta \rightarrow +0$  і при  $\theta = 0$  маємо  $\omega_{max} = 2\gamma(\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)/\hbar$ .

У тому випадку, коли  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta < 0$ , вигляд рівняння (34.6) залежить від співвідношення двох складових у підкореновому виразі в (34.5), зокрема, якщо:

$$(\beta n \cos \theta - 1)^2 > 2 \left| \frac{(\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1) \right|, \quad (34.13)$$

то (34.5) набуває такої форми:

$$\omega_{rad} = \frac{\gamma mc^2}{\hbar (n^2 - 1)} \left[ -\sqrt{(\beta n \cos \theta - 1)^2 + 2 \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1)} + (\beta n \cos \theta - 1) \right]. \quad (34.14)$$

Очевидно, що умова (34.13) відповідає параметрам, далеким від критичного значення  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta \rightarrow -0$ . Рівняння (34.14) має зміст за умови

$$\frac{(\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1) < 0. \quad (34.15)$$

Простий аналіз показує, оскільки в даному випадку  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta < 0$ , то це може бути тільки при  $(n^2 - 1) > 0$ . У цьому випадку умова (34.13) може виконуватися тільки при  $\varepsilon_2^* < \varepsilon_1^*$ , що відповідає аномальному ефекту Доплера, при якому процес випромінювання супроводжується переходом на вищий рівень енергії.

Із рівняння (34.14) знаходимо

$$\omega_{rad} \approx \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\gamma \hbar (\beta n \cos \theta - 1)} \left[ 1 - \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(n^2 - 1)}{2\gamma^2 mc^2 (\beta n \cos \theta - 1)^2} \right], \quad (34.16)$$

Цей розв'язок описує зростання частоти випромінювання при зменшенні абсолютного значення різниці  $\beta n(\omega) \cos \theta - 1$  і відображається гілкою *EK* на рис. 34.1. Максимальне значення частоти на цій гілці в точці *K* дорівнює величині (34.12).

В іншому випадку, який визначається умовою

$$(\beta n \cos \theta - 1)^2 < 2 \left| \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1) \right|, \quad (34.17)$$

рівняння (34.5) набуває вигляду

$$\omega_{rad} = \frac{\gamma mc^2}{\hbar(n^2 - 1)} \left[ \sqrt{(\beta n \cos \theta - 1)^2 + 2 \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1)} + (\beta n \cos \theta - 1) \right]. \quad (34.18)$$

Аналіз виразів (34.17) і (34.18) показує, що другий доданок під знаком кореня в (34.18) є додатною величиною. Унаслідок цього з (34.7) випливає, що частота випромінювання зменшується при зменшенні абсолютного значення різниці  $\beta n(\omega) \cos \theta - 1$ , що відповідає гілці *DC*. Цікаво зазначити, що цей розв'язок відповідає нормальному ефекту Доплера ( $\varepsilon_2^* > \varepsilon_1^*$ ) в області параметрів  $(n^2 - 1) > 0$  та  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta < 0$ , які при стандартному розгляді на основі формули (34.1) відповідають аномальному ефекту Доплера. Максимальне значення частоти випромінювання на цій гілці (у точці *D*)

$$\omega_{rad,D} \approx \sqrt{2 \frac{mc^2(\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*)}{(n^2 - 1)\hbar^2} (1 + \sqrt{2})} \quad (34.19)$$

у  $(1 + \sqrt{2})$  разів перевищує максимальне значення  $\omega_{rad,K}$  у точці *K* на гілці *EK* (34.11). Видно, що в точках *K* і *D* існує розрив функції залежності частоти випромінювання від різниці  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta$ . Координата цих точок дорівнює

$$(1 - \beta n \cos \theta)_{K,D} \equiv -\Delta/2 = -\sqrt{2 \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1)}. \quad (34.20)$$

Аналогічним чином можна розглянути особливості протилежного процесу – поглинання фотона рухомою частинкою, яка має початковий рівень енергії  $\varepsilon_1$  і кінцевий  $\varepsilon_2$ . Ця задача відповідає законам збереження енергії та імпульсу

$$\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + (mc^2 + \varepsilon_1)^2} + \hbar \omega_{abs} = \sqrt{(\vec{p} + \Delta \vec{p})^2 c^2 + (mc^2 + \varepsilon_2)^2}; \quad (34.21)$$

$$\Delta \vec{p} = \hbar \vec{k}; \quad \vec{k} = \vec{e}_k n \omega_{abs} / c;$$

і після тієї ж заміни  $\varepsilon_{1,2}^* = \varepsilon_{1,2}(1 + \varepsilon_{1,2}/2mc^2)$  характеризується розв'язком

$$\omega_{abs} = \frac{\gamma mc^2}{\hbar(n^2 - 1)} \left[ (1 - \beta n \cos \theta) \mp \sqrt{(1 - \beta n \cos \theta)^2 - 2 \frac{\varepsilon_2^* - \varepsilon_1^*}{\gamma^2 mc^2} (n^2 - 1)} \right]. \quad (34.22)$$

Рівняння (34.21) і (34.22) вочевидь відмінні від аналогічних рівнянь (34.2) і (34.5) при випромінюванні. Результати аналізу (34.22), проведені за схемою аналізу (34.5), також представлено на рис. 34.1. Частоті поглинання відповідають гілки *AM* (область нормального ефекту Доплера) і *GE* (область аномального ефекту).

Таким чином, отримані особливості процесів випромінювання та поглинання квантів в умовах, близьких до екстремальних, демонструють:

а) немонотонний характер залежності спектрів від величини  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta$ ;

б) наявність розривів у спектрах частот випромінювання та поглинання;

в) існування знакозмінних співвідношень між цими частотами. З аналізу випливає, що найбільш важливі особливості спектрів не відповідають точній умові  $\beta n(\omega) \cos \theta = 1$ , а зміщені симетрично неї в обидва боки. Зокрема, якщо в області  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta > 0$  частота випромінювання менша від частоти поглинання, то в області  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta < 0$  частота випромінювання перевищує частоту поглинання. За екстремальної умови  $\beta n(\omega) \cos \theta = 1$  ці частоти рівні. Максимальна різниця частот відповідає умовам  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta = \pm \Delta/2$ . У цих точках зміна відношення частот випромінювання та поглинання дуже велика:  $(\omega_{rad})_D / (\omega_{abs})_F = (\omega_{abs})_G / (\omega_{rad})_B \approx 6$ .

Із результатів випливає, що в межах області шириною  $\Delta(\beta, \omega, \theta)$  можна забезпечити вимушене випромінювання (із реалізацією підсилення в лазерах на основі системи рухомих частинок) на частоті  $\omega_{rad}$  з одночасним дуже істотним пригніченням резонансного поглинання на частоті  $\omega_{abs}$ . При цьому відпадає необхідність у створенні інверсії для лазерної генерації! Цей результат може відігравати дуже істотну роль, наприклад: при оптимізації лазерів на вільних електронах, при створенні лазерів на основі релятивістських гіротронів і на основі систем каналованих релятивістських частинок у кристалах.

**Додаткова література:** [VIII], [IX].

## § 35. Фізичні основи явища каналювання. Квантований рух і випромінювання швидких заряджених частинок у кристалах

### 35.1. Фізичні принципи явища каналювання

Процеси взаємодії частинок з упорядкованими кристалами визначаються різними механізмами. Найбільш відоме явище дифракції заряджених і нейтральних мікрочастинок. Його реалізація К. Девісоном і Л. Джермером була базою підтвердження існування хвилі де Бройля (див. § 1). Така дифракція є делокалізованим явищем, яке визначається процесами когерентної інтерференції хвиль, розсіяних різними кристалічними площинами або осями.

Менше відомо явище каналювання заряджених частинок в упорядкованих кристалах. Таке явище аномально великого пробігу швидких позитивних іонів, що влітають у монокристал уздовж його головних кристалографічних напрямків, було передбачено на початку 60-х рр. у результаті моделювання процесу на ЕОМ, а пізніше виявлено експериментально.

Основна ідея, що суттєво спрощує теоретичний аналіз ефекту каналювання, полягає в заміні реального періодичного потенціалу атомів кристала потенціалом, усередненим за координатами атомів у кристалографічній осі чи площині (відповідно осьове і площинне каналювання). Таке наближення особливо ефективно, якщо кут падіння частинки на вісь чи площину досить малий, тоді частинка, що розсіюється на малий кут, після взаємодії з одним атомом, потрапляє в область дії наступного атома. Оскільки сили притягування цими атомами (чи сили відштовхування, якщо частинка позитивно заряджена) спрямовані в один бік, то відбувається порівняно плавний поворот імпульсу частинки внаслідок зіткнень з великою кількістю атомів осі чи площини (рис. 35.1).

Можливість і умова заміни дискретного потенціалу на усереднений неперервний впливають зі співвідношення невизначеностей Гейзенберга для повздовжньої координати та повздовжнього імпульсу частинки. Розглянемо умови такої заміни на прикладі упорядкованого руху

позитивно зарядженої частинки між сусідніми кристалічними площинами (рис. 35.1). Представимо, що ми замінили опис процесу взаємодії частинки з атомами, які розташовані на стінках каналу, на взаємодію з неперервним потенціальним бар'єром висотою  $V_{\max}$ , який отриманий у результаті усереднення реального періодичного потенціалу кожного з атомів за площею відповідної елементарної ґратки. Процес зміни напрямку руху частинки в каналі пружний, йому відповідає неперервна зміна напрямку вектора імпульсу частинки  $\vec{p}$ . При цьому зміна повздовжньої компоненти імпульсу визначається формулою

$$\Delta p_z = p - \sqrt{p^2 - p_{\perp}^2} \approx p - p(1 - \frac{p_{\perp}^2}{2p^2}) = \frac{p_{\perp}^2}{2p} \quad (35.1)$$

і залежить від поточного значення поперечного імпульсу частинки  $\vec{p}_{\perp}$ .

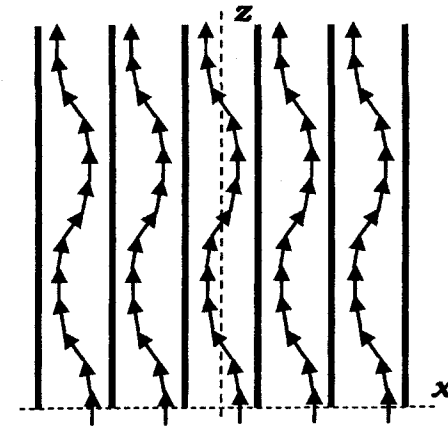


Рис. 35.1. Класична модель каналювання позитивно заряджених частинок у кристалічних каналах

Максимальна зміна повздовжнього імпульсу

$$(\Delta p_z)_{\max} \approx \frac{p_{\perp(\max)}^2}{2p} = \frac{mV_{\max}}{p} \quad (35.2)$$

визначається максимальним значенням поперечного імпульсу в каналі, який, у свою чергу, залежить від висоти потенціального бар'єра

$$V_{\max} = \frac{p_{\perp(\max)}^2}{2m}.$$

Виходячи зі співвідношення невизначеностей Гейзенберга  $\delta z \geq \hbar/2\delta p_z$  легко визначити мінімальне значення дисперсії повздовжньої координати й відповідно середньоквадратичний інтервал повздовжнього руху  $\delta z_{\min}$ , на якому відбувається зміна імпульсу частинки в каналі

$$\delta z_{\min} \equiv \sqrt{\langle (\Delta z)^2 \rangle_{\min}} \geq \frac{\hbar}{2\sqrt{\langle (\Delta p_z)^2 \rangle_{\max}}} = \frac{\hbar p}{2mV_{\max}}. \quad (35.3)$$

Величина  $\delta z_{\min}$  характеризує область розсіювання у повздовжньому напрямку, у межах якої структура розсіювача принципово не може бути визначеною. Видно, що вона залежить від повного імпульсу частинки і зростає зі збільшенням цього імпульсу. Якщо середньоквадратична величина  $\delta z_{\min}$  (35.3) буде перевищувати міжатомну відстань  $d_a$ , то реальна структура атомного потенціалу розсіювання рухомої частинки на цьому інтервалі не буде впливати на процес розсіювання, а цей потенціал можна замінити його середнім значенням. Очевидно, що така заміна можлива для швидких частинок за умови  $p \geq 2mV_{\max}d_a/\hbar$ . Аналогічна умова відповідає також руху під малим кутом щодо кристалічної осі. Зокрема при русі вздовж кристалічної осі усереднена у такий спосіб потенціальна енергія має вигляд

$$V(r_{\perp}) = \frac{q}{d_a} \int_{-d_a/2}^{d_a/2} \varphi(\sqrt{r_{\perp}^2 + z^2}) dz, \quad (35.4)$$

де  $\varphi(\sqrt{r^2 + z^2})$  – потенціал окремого атома,  $r_{\perp} = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $d_a$  – відстань між атомами в напрямку руху частинки вздовж осі.

Подібні міркування можна використовувати, коли частинки падають під малим кутом щодо кристалографічної площини. При цьому позитивно заряджені частинки відбиваються потенціальним бар'єром площини, усередненим за координатами  $y$  і  $z$  атомів цієї площини:

$$V(x) = \frac{q}{S} \iint_S \varphi(\sqrt{r^2 + z^2}) dydz, \quad (35.5)$$

де  $S$  – площа, що припадає на один атом у площині. Негативно заряджені частинки коливаються біля площини, притягуючись до неї, проте їх рух по рівноважним траєкторіям у неперервному потенціалі менш стійкий, ніж рух позитивно заряджених частинок, що здійснюють коливання між сусідніми площинами. Причина полягає в тому, що позитрони не підходять близько до атомів, які здійснюють теплові коливання.

Оскільки для негативно заряджених частинок (електронів) потенціал ланцюжка є таким, що притягує, частинка або перетинає ланцюжок, або (якщо енергії її поперечного руху не вистачає для подолання потенційного бар'єра) коливається біля нього, неминуче проходячи через область теплових коливань атомів ланцюжка. Можливість близького зіткнення класичної частинки з атомом, що відхилився від положення рівноваги, призводить до сильної нестійкості її руху по траєкторії в безперервному потенціалі. В ідеальному ж кристалі, частинка, що рухається під малим кутом до ланцюжка, практично "не відчуває" окремих атомів, і потенціал ланцюжка можна усереднити за подовжньою координатою  $z$ .

Наближення неперервного потенціалу набуло значного поширення як загальний метод дослідження проходження через кристали швидких частинок, довжина хвилі де Бройля яких значно менша відстані між атомами. Форма неперервних потенціалів, глибина потенційних ям і висота бар'єрів, що обмежують поперечний рух каналюваних частинок, виявляється визначальною для їх руху та електромагнітного випромінювання. Розрахунки неперервних потенціалів (35.4) і (35.5) базуються на добре відомих наближеннях для потенціалів ізольованих атомів [X, XI]: наближення Томаса – Фермі; наближення Хартрі – Фока з урахуванням, коли це необхідно, релятивістських доповнень.

Окрім просторового усереднення потенціалу, пов'язаного з особливостями квантово-механічної взаємодії, необхідно провести додаткове усереднення, пов'язане з тепловими коливаннями атомів біля положення рівноваги в кристалах. Слід зазначити, що вирази для потенціалів каналу, отримані за допомогою перерахованих вище апроксимацій, виявляються досить складними для використання їх в аналітичних розрахунках спектрів та інших характеристик випромінювання при каналюванні. Однак у більшості випадків їх можна з достатньою точністю замінити іншими, більш простими виразами (модельними потенціалами), що допускають аналітичне вирішення задачі.

Наприклад, для площинного каналювання позитивно заряджених частинок (позитронів і протонів) неперервний потенціальний бар'єр, який відповідає впливу двох сусідніх кристалічних площин на рух заряджених частинок у межах каналу  $-a/2 \leq x \leq a/2$ , у першому наближенні має вигляд параболи

$$V(x) = 4V_0 \frac{x^2}{a^2}, \quad (35.7)$$

де  $V_0$  – висота стінки каналу,  $a$  – ширина каналу. Величина  $V_0$  залежить від типу кристалічних площин, від заряду атомів, які утворюють

ці площини і меншою мірою від температури. Типові значення  $V_0$  лежать у інтервалі від  $V_0 \approx 10 \text{ eV}$ , для легких атомів із зарядом ядер  $Z \approx 5-10$  до  $V_0 \approx 50-70 \text{ eV}$ , для важких з  $Z \approx 50-70$ .

Параболічний потенціальний бар'єр каналу (35.7) відповідає гармонічному осцилятору й може бути переписаний у відповідній формі

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (35.8)$$

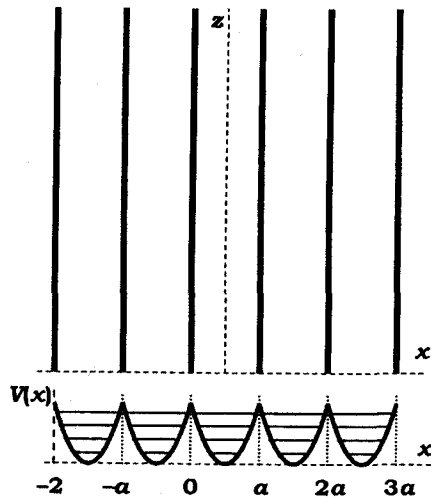


Рис. 35.2. Квантування поперечного руху позитивно заряджених частинок у параболічних кристалічних каналах

При такому описі кристал характеризується періодичною системою міжплощинних потенціальних ям, які представлено на рис. 35.2. Розв'язок рівняння Шредінгера для потенціалу (35.8):

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \Psi_n(x) = \varepsilon_n \Psi_n(x)$$

відповідає дискретному еквідистантному спектру поперечної енергії гармонічного осцилятора  $\varepsilon_n = \hbar\omega(n+1/2)$  і хвильовим функціям каналованої в кристалі частинки

$$\Psi_n(x) = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) / \sqrt{x_0 \sqrt{\pi} 2^n n!}, \quad (35.9)$$

де  $\xi = x/x_0$ ,  $\omega = \sqrt{8V_0/ma^2}$ ,  $x_0 = \sqrt{m\omega/\hbar}$ . Повна кількість рівнів енергії в потенціальній ямі (35.8) відповідає умові

$$n_{\max} \approx V_0/\hbar\omega - 1/2 \approx \sqrt{ma^2V_0/8\hbar^2} - 1/2. \quad (35.10)$$

Очевидно, що в тому випадку, коли  $ma^2V_0/8\hbar^2 \leq 1$ , у каналі буде єдиний рівень. Цей результат пов'язаний з тим, що в будь-якій мілкій симетричній одномірній ямі завжди наявний один рівень квантованого стану. Наприклад, для нерелятивістського позитрона при  $a = 2 \text{ \AA}$  і  $V_0 \approx 10 \text{ eV}$  маємо  $ma^2V_0/8\hbar^2 \approx 0,08$ . Водночас для протона  $ma^2V_0/8\hbar^2 \approx 130$  і в каналі буде існувати  $n_{\max} \approx 11$  рівнів. При зростанні висоти стінки каналу до  $V_0 \approx 70 \text{ eV}$  кількість рівнів зростає до  $n_{\max} \approx 30$ .

Заселення квантових станів каналованого руху відбувається на вході кристала при зшиванні хвильової функції падаючої частинки  $\Psi(x, z \leq 0) = a^{-1/2} \exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)$  із суперпозицією власних функцій у каналі  $\sum_n c_n \Psi_n(x, z \geq 0)$ . Із процедури такого зшивання визначаються коефіцієнти заселення різних станів каналованого руху

$$c_n = \int_{-a/2}^{a/2} \Psi(x, z \leq 0) \Psi_n^*(x, z \geq 0) dx \Big|_{z=0}. \quad (35.11)$$

Характер каналювання істотно змінюється у випадку релятивістських частинок. Їх рух описується рівняннями Клейна – Гордона або Дірака, де враховано, що маса рухомої частинки в лабораторній системі координат зростає і  $m \rightarrow \gamma m$  ( $\gamma$  – релятивістський лоренц-фактор). Для спрощеного аналізу можна перейти в рухому (супутню) систему координат, якій відповідає рівняння Шредінгера з незмінною масою частинки  $m$  і релятивістським трансформованим потенціальним бар'єром (ямою)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \gamma V(x) \right\} \Psi_n(x) = \varepsilon_n \Psi_n(x). \quad (35.12)$$

У цьому випадку проведені на основі (35.10) обчислення залишаються незмінними з урахуванням заміни  $V_0 \rightarrow \gamma V_0$ . При  $\gamma \gg 1$  маємо  $n_{\max} \sim \sqrt{\gamma}$ , що свідчить про виникнення додаткових рівнів у системі міжплощинного каналу.

Рух частинок з від'ємним зарядом (напр. електрона) відповідає руху в потенціальній ямі з мінімумом, який перебуває в межах кристалічної площини. Ширина цієї ями залежить від радіуса екранування

атомів і від температури кристала. Для цього випадку типовою є ширина каналу  $(a/6)...(a/8)$ , що призводить до відповідного зменшення кількості рівнів квантованих станів.

## 35.2. Випромінювання каналюваних частинок

Заряджена частинка, яка перебуває в одно- або двомірному квантовому полі кристалічних площин або осей, є своєрідним одно- або двомірним атомом. Частинка, яка перебуває на одному із збуджених квантових рівнів, може здійснити спонтанний або вимушений перехід на нижче розташований рівень. При такому переході випромінюється квант. Принципова відмінність від випадку звичайних атомів полягає в тому, що цей квазіатом швидко рухається і частота випромінювання вирішальною мірою залежить від ефекту Доплера

$$\omega = \frac{\Omega_{ij}}{1 - \beta n(\omega) \cos \theta}. \quad (35.13)$$

Для подальшого аналізу обмежимося випадком  $1 - \beta n(\omega) \cos \theta > \Delta/2$ , що відповідає нормальній дисперсії (див. рис. 34.1).

У власній системі координат частота переходу між сусідніми рівнями релятивістського квазіатома визначається формулою

$$\Omega_{ij} \equiv \sqrt{8\gamma V_0 / ma^2} = \omega_{ij} \sqrt{\gamma}, \quad (35.14)$$

у якій  $\omega_{ij} = \sqrt{8V_0 / ma^2}$  – частота переходу при нерелятивістському русі частинки в тому самому параболічному каналі (35.8).

Максимальна частота випромінювання відповідає куту  $\theta = 0$  і за відсутності дисперсії  $n(\omega) = 1$  визначається виразом

$$\omega_{\max} = \frac{\Omega_{ij}}{1 - \beta} \approx 2\gamma^2 \Omega_{ij} = 2\gamma^{5/2} \omega_{ij}. \quad (35.15)$$

Відповідно мінімальна частота випромінювання відповідає куту  $\theta = \pi$  і характеризується виразом

$$\omega_{\min} = \frac{\Omega_{ij}}{1 + \beta} \approx 2\Omega_{ij} = 2\gamma^{1/2} \omega_{ij}. \quad (35.16)$$

Порівняння (35.15) і (35.16) показує, що на одній і тій самій системі каналюваних частинок можна створити джерело випромінювання, загальний динамічний діапазон якого буде лежати в смузі частот  $\omega_{\max} / \omega_{\min} \approx 4\gamma^2$ . При досягнутих на сьогодні значеннях енергії позитронів (або електронів), яким відповідають  $\gamma \approx 10^5$ , відношення максимальної до мінімальної частоти випромінювання може сягати десяти порядків (від НВЧ до жорсткого  $\gamma$ -випромінювання)! Разом з майже повною інверсією, яка може бути досягнута за відповідних початкових значень поперечної енергії пучка, що влітає в кристал, це дає надзвичайно перспективну можливість створювати лазерні системи, які можна перестроювати. Такий лазер буде працювати в дуже широкому діапазоні частот  $\omega_{\max} / \omega_{\min} \gg 1$ , а вибір відповідної частоти можна здійснювати звичайним поворотом резонатора щодо кристала. Однак для досягнення необхідних коефіцієнтів підсилення системи необхідна надзвичайно висока щільність потоку швидких каналюваних частинок. Необхідні для цього струми на сьогодні поки ще недосяжні [XII]. Одним із можливих механізмів збільшення коефіцієнта підсилення є забезпечення когерентності між різними квантовими станами каналюваної частинки.

*Додаткова література:* [X] – [XII].

## 35.3. Механізми каналювання нейтральних частинок

Ефект каналювання в кристалах притаманний також нейтральним частинкам. Найбільш ефективним є механізм керування їх рухом за рахунок магнітного моменту [XIII]. Для прикладу розглянемо рух нейтрона з релятивістським імпульсом  $\vec{p}_y = p\vec{e}_y$  та аномальним магнітним моментом  $\mu_a$  в усередненому по кристалічній площині (уздовж напрямків  $\vec{e}_y$  та  $\vec{e}_z$ ) потенціалі кристалічної площини  $\Phi(x) = \langle \Phi(x, y, z) \rangle_{y,z}$ . Для таких частинок рівняння Дірака зводиться до системи рівнянь:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\mu_a \hbar}{2mc} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\mu_a^2}{2mc^2} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \mu_a \sqrt{\gamma^2 - 1} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

(35.17, а)

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\mu_a \hbar}{2mc} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\mu_a^2}{2mc^2} \left( \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)^2 \right) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} + \mu_a \sqrt{\gamma^2 - 1} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \begin{pmatrix} \psi_3 \\ -\psi_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}.$$

(35.17, б)

Для надрелятивістського руху (при  $\gamma \gg 1$ ) з (35.17) отримуємо

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \gamma \mu_a \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right) \psi_{1,4} = E \psi_{1,4},$$

(35.18, а)

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \gamma \mu_a \frac{\partial \Phi(x)}{\partial x} \right) \psi_{2,3} = E \psi_{2,3}.$$

(35.18, б)

Із (35.18) випливає, що кожній парі станів ультрарелятивістського нейтрона відповідає система потенціальних ям і бар'єрів

$$V_{\gamma \mu_a}(x) = \pm \gamma \mu_a \partial \Phi(x) / \partial x. \quad (35.19)$$

Вигляд потенціальної енергії (35.19), хвильові функції та рівні енергії каналованих нейтронів при  $\gamma = 100$  представлено на рис. 35.3.

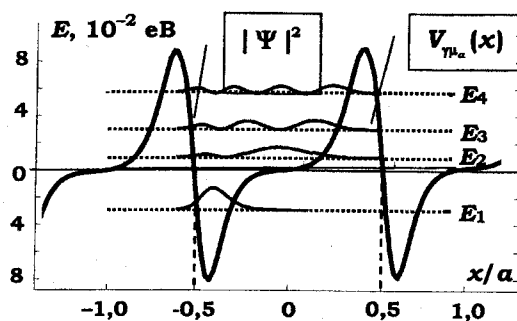


Рис. 35.3. Квантування поперечного руху релятивістських нейтронів з  $\gamma = 100$  у модельному потенціалі  $\Phi(x) = \sum_n \Phi_0 / \text{ch}^2\{(x - na)/u\}$  системи площин кристала  $W$

Додаткова література: [X] – [XIII].

## СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

### Підручники

1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики : учебник. – М.: Наука, 1976.
2. Вакарчук І.О. Квантова механіка : підручник. – Львів: Вид-во Львівського ун-ту, 1998.
3. Давыдов А.С. Квантовая механика : учебник. – М.: Наука, 1973.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика : учебник. – М.: Наука, 1989.
5. Находкін М.Г., Шека Д.І. Атомна фізика : підручник. – К.: ВПЦ "Київський цеіверситет", 2002.
6. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. – М.: Фіз.-мат. лит., 1963.
7. Фон Нейман И. Математические основы квантовой механики. – М.: Фіз.-мат. лит., 1964. – Гл. 3.

### Збірники задач

8. Гречко Л.Г., Сугаков В.И., Томасевич О.Ф., Федорченко А.М. Сборник задач по теоретической физике : учебное пособие. – М.: Высшая шк., 1972.
9. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. – В 2 т.: учебное пособие. – М.: Мир, 1974.
10. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике : учебное пособие. – М.: Наука, 1981.



## СПИСОК ДОДАТКОВОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- I. Блум К. Теория матрицы плотности и ее приложения. – М., Мир, 1983.
- II. Додонов В.В., Манько В.И. Инварианты и коррелированные состояния нестационарных квантовых систем // Тр. ФИАН. – 1988. – Т. 183. – С. 71–175.
- III. Коулмен С. Магнитный монополюль – пятьдесят лет спустя // Усп. физ. наук. – 1984. – Т. 144. – С. 277–300.
- IV. Соколов А.А., Тернов И.М. Релятивистский электрон. – М.: Наука, 1974.
- V. Robertson H.P. A general formulation of the uncertainty principle and its classical interpretation // Phys. Rev. A. – 1930. – Vol. 35. – P. 667–668.
- VI. Vysotskii V.I. The problem of controlled spontaneous nuclear gamma-decay: theory of controlled excited and radioactive nuclei gamma-decay // Phys. Rev. C. – 1998. – Vol. 58. – P. 337–350.
- VII. Высокый В.И., Русов В.Д., Зеленцова Т.Н. Нейтринная диагностика внутриреакторных процессов и топливосодержащих масс // Ядерная и радиационная безопасность. – 1998. – Т. 1. – Вып. 1. – С. 66–96.
- VIII. Vysotskiy M.V., Vysotskii V.I. The Doppler effect in a medium for radiation sources in motion at extreme conditions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2006. – Vol. 252. – P. 75–80.
- IX. Высокый М.В., Высокый В.И. Эффект Доплера при экстремальном условии Вавилова – Черенкова и предел частоты излучения при каналировании // Поверхность. – 2007, № 3. – С. 72–78.
- X. Оцуки Е.Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. – М.: Наука, 1985.
- XI. Базылев В.А., Жеваго Н.К. Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях. – М.: Наука, 1987.
- XII. Высокый В.И., Кузьмин Р.Н. Гамма-лазеры. – М.: Изд-во МГУ, 1989.
- XIII. Высокый В.И., Кузьмин Р.Н. Каналирование нейтральных частиц и квантов в кристаллах // Усп. физ. наук. – 1992. – Т. 162, № 9. – С. 2–47.

## Додаток

### Основні фізичні константи

Гравітаційна стала	$G = 6,672 \cdot 10^{-8} \text{ ерг см/г}^2$
Заряд електрона	$e = 4,8 \cdot 10^{-9} \text{ ерг}^{1/2} \text{ см}^{1/2}$
Маса спокою електрона	$m_e = 0,91 \cdot 10^{-27} \text{ г}$
Класичний радіус електрона	$r_e = 2,82 \cdot 10^{-13} \text{ см}$
Магнетон Бора	$M_B = 0,927 \cdot 10^{-20} \text{ ерг/Гс}$
Маса спокою протона	$m_p = 1,6726 \cdot 10^{-24} \text{ г}$
Маса спокою нейтрона	$m_n = 1,6749 \cdot 10^{-24} \text{ г}$
Стала Планка	$\hbar = 1,055 \cdot 10^{-27} \text{ ерг с}$
Стала Больцмана	$k_B = 1,38 \cdot 10^{-16} \text{ ерг/К}$
Стала Стефана – Больцмана	$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-5} \text{ ерг/с см}^2 \text{ К}^4$
Стала Рідберга	$Ry = m_e e^4 / 2\hbar^2 \approx 13,6 \text{ еВ}$

Навчальне видання

**ВИСОЦЬКИЙ** Володимир Іванович

**КВАНТОВА МЕХАНІКА  
ТА ЇЇ ВИКОРИСТАННЯ  
У ПРИКЛАДНІЙ ФІЗИЦІ**

Підручник

Редактор *Л.П. Львова*

Оригінал-макет виготовлено Видавничо-поліграфічним центром "Київський університет"

Виконавець *К.Г. Степаненко*



Підписано до друку 29.12.08. Формат 70x100<sup>1/16</sup>. Вид. № 383. Гарнітура Bookman Old Style.  
Папір офсетний. Друк офсетний. Наклад 300. Ум. друк. арк. 29,7. Обп.-вид. арк. 24,3. Зам. № 28-4641

Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет"  
01601, Київ, б-р Т.Шевченка, 14, кімн. 43  
☎ (38044) 239 32 22; (38044) 239 31 61; тел./факс (38044) 239 31 28  
e-mail: vydav\_polygraph@univ.kiev.ua  
www: <http://vpc.univ.kiev.ua>

Свідоцтво внесено до Державного реєстру ДК № 1103 від 31.10.02

НБ ПНУС



778701