

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
Кафедра теоретичної фізики та методики викладання фізики

Василь БОЙЧУК, Віталій ГОЛЬСЬКИЙ, Ірина ШАКЛЕІНА

ТЕОРЕТИЧНА ФЗИКА.

КВАНТОВА МЕХАНІКА

Навчальний посібник

Частина II

Дрогобич
2013

**ББК
УДК
Б**

Рекомендовано до друку вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка
як навчальний посібник
(протокол _____ року).

Рецензенти:

Ткач Микола Васильович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича;

Пелещак Роман Михайлович, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Бойчук В., Гольський В., Шаклеїна І.

Б 77 Теоретична фізика. Квантова механіка: навчальний посібник. Частина II. – Дрогобич : Редакційно-видавничий відділ Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка, 2013. – 225 с.

Посібник укладено відповідно до програми навчальної дисципліни «**Теоретична фізика. Квантова механіка**» для підготовки фахівців ОКР «Бакалавр» галузі знань «0402. Фізико-математичні науки» напряму підготовки «6.040203. Фізика», затвердженої вченою радою Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка.

Бібліографія 24 назви.

**ББК 22.314я73
УДК 514.84(075.8)**

Зміст

Вступ.....	5
Розділ 1. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера	6
§ 1. Стаціонарна теорія збурень	6
§ 2. Ефект Штарка	10
§ 3. Нестационарна теорія збурень	12
§ 4. Варіаційний метод Рітца	18
§ 5. Квазікласичне наближення.....	20
§ 6. Частинка в потенціальній ямі довільної форми	26
Приклади розв'язування задач.....	32
Задачі для самостійного опрацювання.....	35
Розділ 2. Релятивістська квантова механіка	39
§ 1. Хвильове рівняння Кляйна-Гордона-Фока	39
§ 2. Рівняння неперервності.....	40
§ 3. Релятивістська теорія водневоподібного атома без врахування спіна електрона	42
§ 4. Рівняння Дірака.....	46
§ 5. Рівняння неперервності в теорії Дірака	49
§ 6. Момент імпульсу частинки.....	50
§ 7. Додавання моментів.....	52
§ 8. Рівняння Дірака в нерелятивістському і слабо релятивістському наближеннях.....	55
§ 9. Тонка структура енергетичного спектру водневоподібного атома.....	64
§ 10. Нормальний та аномальний ефект Зеемана	71
§ 11. Точний розв'язок рівняння Дірака для вільної частинки	82
§ 12. Стани з від'ємною енергією. Відкриття позитрона.....	89
Приклади розв'язування задач.....	93
Задачі для самостійного опрацювання.....	98
Розділ 3. Квантова механіка системи багатьох частинок	104
§ 1. Хвильова функція системи багатьох частинок.....	104

§ 2. Системи однакових частинок. Принцип тотожності частинок	105
§ 3. Теорія атома гелію.....	109
§ 4. Багатоелектронні атоми.....	117
§ 5. Періодична система елементів	122
§ 6. Елементарна теорія молекул. Адіабатичне наближення	125
§ 7. Молекула водню	130
§ 8. Хімічні зв'язки в молекулах.....	133
§ 9. Класифікація електронних станів молекул.....	140
Приклади розв'язування задач.....	143
Задачі для самостійного опрацювання.....	148
Розділ 4. Квантова теорія випромінювання та поглинання світла	151
§ 1. Спонтанний та вимушений переходи	151
§ 2. Квантування вільного електромагнітного поля	153
§ 3. Виведення коефіцієнтів Айнштейна з квантової теорії випромінювання	156
§ 4. Теорія дисперсії світла	165
§ 5. Елементарна теорія фотоефекту.....	174
§ 6. Правила відбору для поглинання чи випромінювання світла ..	180
Приклади розв'язування задач.....	184
Задачі для самостійного опрацювання.....	187
Розділ 5. Квантова теорія розсіювання.....	191
§ 1. Основні поняття теорії розсіювання.....	191
§ 2. Пружне розсіювання. Борнівське наближення	192
§ 3. Розсіювання на потенціалі Юкави	203
§ 4. Парціальний ефективний переріз	205
Приклади розв'язування задач.....	210
Задачі для самостійного опрацювання.....	213
Контрольні запитання до курсу	217
Література	221
Іменний покажчик	223
Предметний покажчик	224

Вступ

Перші частина навчального посібника «Квантова механіка» побачила світ в 2012 році під назвою «Основи квантової механіки». В цьому посібнику викладено дійсно основи курсу. Є студенти, яким важливо чітко знати, що є базисом, основою всього курсу. До них можна віднести студентів, що навчаються на екстернатній та заочній формі навчання. Тому «Основи квантової механіки» містять лише три розділи: «Передумови виникнення квантової механіки», «Постулати квантової механіки» та «Найпростіші задачі квантової механіки». В останньому розділі розглянуто такі теми, як частинка в потенціальній ямі, лінійний гармонічний осцилятор, обертальний момент імпульсу частинки, спин частинки, рух частинки в центральносиметричному полі, теорія атома водню.

Запропонована читачеві друга частина навчального посібника «Квантова механіка» продовжує розгляд інших важливих питань і тем курсу. Зокрема, пропонуються такі розділи: «Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера», «Релятивістська квантова механіка», «Квантова механіка системи багатьох частинок», «Квантова теорія випромінювання та поглинання світла» та «Квантова теорія розсіювання».

Як у першій, так і в другій частині курсу кожен розділ завершується прикладами розв'язування типових задач, а також подано умови задач для самостійного розв'язування. Посібники містять контрольні запитання, літературу, іменний та предметний покажчики, що допомагатиме студентам при освоєнні непростой, але дуже цікавої науки – квантової механіки.

Розділ 1. Наближені методи розв'язку рівняння Шредінгера

§ 1. Стаціонарна теорія збурень

Точний розв'язок рівняння Шредінгера можна знайти лише для невеликої кількості найпростіших квантових систем. Більшість задач зводяться до складних рівнянь, які точно не розв'язуються. Однак існують такі фізичні умови, коли в задачі фігурують величини різного порядку. Серед них можуть виявитись малі величини, після нехтування якими задача спрощується так, що можна отримати її точний розв'язок.

Отже, поставлена фізична задача розв'язується шляхом виконання двох етапів. По-перше, потрібно розв'язати спрощену задачу, яка має точний розв'язок. По-друге, обчислити поправки, які зумовлені існуванням малих доданків у вихідній задачі. Метод для обчислення поправок називається теорією збурень.

Нехай гамільтоніан системи не залежить від часу. Необхідно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1.1)$$

для гамільтоніана

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{r}), \quad (1.2)$$

в якому перший доданок є основним і з ним можна точно розв'язати рівняння Шредінгера, а $V(\vec{r})$ є малою поправкою, збуренням до гамільтоніана $\hat{H}_0$. Збурення, як і гамільтоніан $\hat{H}$, не залежить явно від часу. Тому теорія, що викладена нижче, називається стаціонарною теорією збурень.

Вважаємо, що розв'язки рівняння Шредінгера з незбуреним гамільтоніаном $\hat{H}_0$ є відомими:

$$\hat{H}_0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0, \quad (1.3)$$

де E_n^0 – енергія Ψ_n^0 -го стану. Як зазначалось вище, розв'язок рівняння (1.1) можна знайти лише наближено. Нехай нас цікавить енергія та хвильова функція n -ого рівня, що відповідають задачі з гамільтоніаном $\hat{H}$.

Енергетичний рівень з енергією E_n^0 може бути виродженим або не виродженим. Залежно від цього існують дві стаціонарні теорії збурень: для не виродженого спектру та виродженого спектру.

Теорія збурень для невиродженого спектру

Запишемо хвильову функцію та енергію n -ого стану, що є розв'язками рівняння (1.1) у вигляді ряду:

$$\Psi = \Psi_n^0 + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)} + \dots, \quad (1.4)$$

$$E = E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots, \quad (1.5)$$

де Ψ_n^0, E_n^0 – величини нульового порядку малості $\Psi_n^{(1)}, E_n^{(1)}$ – величини першого порядку малості, $\Psi_n^{(2)}, E_n^{(2)}$ – величини другого порядку малості тощо.

Підставимо (1.4) і (1.5) в рівняння (1.1). Отримаємо

$$[\hat{H}_0 + V(r)](\Psi_n^0 + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)} + \dots) = (E_n^0 + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots)(\Psi_n^0 + \Psi_n^{(1)} + \Psi_n^{(2)} + \dots). \quad (1.6)$$

Спочатку у рівнянні (1.6) врахуємо величини нульового і першого порядку малості:

$$\hat{H}_0 \Psi_n^0 + \hat{H}_0 \Psi_n^{(1)} + V(r) \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0 + E_n^{(1)} \Psi_n^0 + E_n^{(1)} \Psi_n^0. \quad (1.7)$$

У рівнянні (1.7) перші доданки однакові, бо враховується рівняння (1.3). Тоді (1.7) спроститься до вигляду:

$$\hat{H}_0 \Psi_n^{(1)} + V(r) \Psi_n^0 = E_n^{(1)} \Psi_n^0 + E_n^{(1)} \Psi_n^0. \quad (1.8)$$

Власні функції $\hat{H}_0$ утворюють повну систему функцій. Будь-яку функцію можна розкласти в ряд по функціях Ψ_m^0 :

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_m C_m \Psi_m^0. \quad (1.9)$$

Підставимо (1.9) у (1.8). Отримаємо, що

$$\hat{H}_0 \sum_m C_m \Psi_m^0 + V(\vec{r}) \Psi_n^0 = E_n^{(1)} \sum_m C_m \Psi_m^0 + E_n^{(1)} \Psi_n^0. \quad (1.10)$$

Домножимо (1.10) на Ψ_n^{0*} і проінтегруємо по всьому простору, використавши те, що власні функції є ортонормованими:

$$\int \Psi_n^{0*} \Psi_m^0 dV = \delta_{n,m}, \quad (1.11)$$

$$\sum_m E_m^0 C_m \delta_{n,m} + \int \Psi_n^{0*} V(\vec{r}) \Psi_n^0 dV = E_n^0 \sum_m C_m \delta_{n,m} + E_n^{(1)} \cdot 1.$$

Після спрощень будемо мати просте рівняння:

$$E_n^0 C_n + V_{nn} = E_n^0 C_n + E_n^{(1)}, \quad (1.12)$$

з якого знаходимо першу поправку до енергії n -ого енергетичного рівня:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \Psi_n^{0*} V \Psi_n^0 dV \equiv \langle \Psi_n^{0*} | V | \Psi_n^0 \rangle. \quad (1.13)$$

Видно, що $E_n^{(1)}$ – це діагональний матричний елемент від збурення на власних хвильових функціях основного гамільтоніана.

З наведених формул можна визначити також першу поправку до хвильової функції розглядуваного стану. Повернемося до (1.10), але домножимо його на Ψ_k^{0*} таке, що $k \neq n$. Отримаємо рівняння:

$$\sum_m E_m^0 C_m \delta_{k,m} + \int \Psi_k^{0*} V(\vec{r}) \Psi_n^0 dV = E_n^0 \sum_m C_m \delta_{k,m} + E_k^{(1)} \int \Psi_k^{0*} \Psi_n^0 dV. \quad (1.14)$$

Другий доданок в лівій частині рівняння є матричним елементом

$V_{kn} = \int \Psi_k^{0*} V(\vec{r}) \Psi_n^0 dV$, другий доданок в правій частині рівняння дорівнює нулю,

бо функції Ψ_n^0 і Ψ_k^0 – ортогональні, тому $E_k^0 C_k + V_{kn} = E_n^0 C_k$, $C_k = \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0}$, де

$E_n^0 \neq E_k^0$, бо $k \neq n$.

Підставимо C_k у формулу першої поправки до хвильової функції (1.9). Маємо

$$\Psi_n^{(1)} = \sum_m \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0} \Psi_m^0, \quad m \neq n. \quad (1.15)$$

Щоб знайти другу поправку до енергії та хвильової функції, потрібно в (1.6) врахувати також величини другого порядку малості. Обчислення показують, що друга поправка до енергії буде мати вигляд:

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^0 - E_m^0}. \quad (1.16)$$

З формул (1.15) та (1.16) видно, що теорія збурень буде справедлива тоді, коли відстань між енергетичними рівнями незбуреної задачі буде набагато більшою за матричні елементи збурення, бо лише за цих умов ряди (1.4) і (1.5) будуть збігатись.

Теорія збурень для виродженого спектру

Розглянемо тепер випадок, коли рівень E_n^0 є s -кратно виродженим:

$$\hat{H}_0 \Psi_{n\alpha}^0 = E_n^0 \Psi_{n\alpha}^0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, s \quad (1.17)$$

Щоб знайти наближено енергію E n -ого рівня системи з гамільтоніаном $\hat{H}$, запишемо хвильову функцію цього стану у вигляді лінійної комбінації функцій $\Psi_{n\alpha}^0$:

$$\Psi = \sum_{\alpha=1}^s C_{\alpha} \Psi_{n\alpha}^0. \quad (1.18)$$

Функції $\Psi_{n\alpha}^0$ ($\alpha=1,2,\dots,s$) є ортонормованими:

$$\int \Psi_{n\alpha}^{0*} \Psi_{n\beta}^0 dV = \delta_{\alpha,\beta}. \quad (1.19)$$

Підставимо Ψ у вигляді (1.18) в рівняння (1.1):

$$\begin{aligned} (\hat{H}_0 + V) \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{n\alpha}^0 &= E \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{n\alpha}^0, \\ \sum_{\alpha} C_{\alpha} E_n^0 \Psi_{n\alpha}^0 + V(r) \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{n\alpha}^0 &= E \sum_{\alpha} C_{\alpha} \Psi_{n\alpha}^0. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Домножимо рівняння (1.20) на $\Psi_{n\beta}^{0*}$ та проінтегруємо по всій області визначення функцій $\Psi_{n\alpha}^0$. Врахуємо умову ортонормованості (1.19). Отримаємо:

$$E_n^0 C_\beta + \sum_\alpha V_{\beta\alpha} C_\alpha = E C_\beta \quad , \quad (1.21)$$

де

$$V_{\beta\alpha} = \int \Psi_{n\beta}^{0*}(\vec{r}) V(\vec{r}) \Psi_{n\alpha}^0(\vec{r}) dV, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \dots, s. \quad (1.22)$$

Вираз (1.21) є системою s лінійних алгебраїчних рівнянь:

[illegible]

Система лінійних однорідних рівнянь має не нульові розв'язки ($C_\alpha \neq 0$) тоді, коли визначник цієї системи дорівнює нулю:

$$\begin{vmatrix} E_n^0 + V_{11} - E & V_{12} & \cdots & V_{1s} \\ V_{21} & E_n^0 + V_{22} - E & \cdots & V_{2s} \\ \vdots & & & \\ V_{s1} & V_{s2} & \cdots & E_n^0 + V_{ss} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (1.24)$$

Нагадаємо, що E – невідома енергія n -го рівня. Цих значень енергії буде s . Якщо всі величини енергії різні, то тоді кажуть, що збурення знімає виродження повністю, якщо деякі розв’язки (1.24) будуть однакові, то збурення лише частково знімає виродження.

Конкретизуємо задачу і розглянемо приклад з $s=2$. Тоді визначник (1.24) спроститься:

$$\begin{vmatrix} E_n^0 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_n^0 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (1.25)$$

Маємо квадратне рівняння відносно E . Воно спроститься, якщо $V_{11} = V_{22} = 0$. Тоді (1.25) можна записати у вигляді

$$(E_n^0 - E)^2 - V_{12}V_{21} = 0. \quad (1.26)$$

Неважко побачити, що $V_{21} = V_{12}^*$. Дійсно, для дійсної потенціальної енергії V

$$V_{12} = \int \Psi_{n1}^{0*} V \Psi_{n2}^0 d\tau; \quad V_{21}^* = \left(\int \Psi_{n2}^{0*} V \Psi_{n1}^0 d\tau \right)^* = \int \Psi_{n2}^0 V \Psi_{n1}^{0*} d\tau = V_{12}^*.$$

Отже, $(E_n^0 - E)^2 = |V_{12}|^2$ тому $E_{1,2} = E_n^0 \pm |V_{12}|$. Збурення повністю зняло виродження. Маємо два різних значення енергії: $E_1 \neq E_2$.

§ 2. Ефект Штарка

Суть ефекту Штарка полягає в тому, що при поміщенні атома в зовнішнє електричне поле, спектральні лінії цього атома розщеплюються. Величина розщеплення залежить від напруженості електричного поля $\vec{E}$. Якщо величина розщеплення пропорційна $\vec{E}$, то маємо лінійний ефект Штарка. Якщо ж величина розщеплення пропорційна E^2 , то квадратичний ефект Штарка.

Нехай в однорідне електричне поле напруженістю $\vec{E}$ поміщено атом водню. Направимо вздовж поля вісь OZ системи координат. Тоді потенціальна енергія взаємодії атома з електричним полем

$$V = -\vec{d}\vec{E} = e\vec{r}\vec{E} = erE \cos(\vec{r} \wedge \vec{E}) = erE \cos \vartheta = ezE, e > 0. \quad (2.1)$$

Основний стан атома водню є невинродженим: $E_1^0 \rightarrow \Psi_{100}^0$. Отже, використовуємо теорію збурень для не винродженого спектру. Енергія основного стану атома в електричному полі

$$E_1 = E_1^0 + V_{100,100} + \sum_{n',l',m'} \frac{|V_{100,n',l',m'}|^2}{E_1^0 - E_{n'}^0}, \quad n' \neq 1. \quad (2.2)$$

Діагональний матричний елемент

$$V_{100,100} = \int \Psi_{100}^* V \Psi_{100} d\tau = \int |\Psi_{100}|^2 eEz dx dy dz = 0 \quad (2.3)$$

як інтеграл від непарної функції по змінній z при симетричних межах інтегрування ($z \in (-\infty, \infty)$). Аналогічно можна дійти висновку, що для всіх станів діагональний матричний елемент $V_{nlm,nlm} = 0$. Отже, енергія електрона основного стану буде визначатися другою поправкою, що є пропорційною E^2 .

Розглянемо тепер перший збуджений стан з $n=2$. Енергетичний рівень без поля E_2^0 є чотирикратно винродженим. Хвильові функції станів мають вигляд:

$$\Psi_1^0 = \Psi_{200}, \Psi_2^0 = \Psi_{210}, \Psi_3^0 = \Psi_{21,-1}, \Psi_4^0 = \Psi_{211}.$$

Згідно з ідеями теорії збурень для винроджених станів, енергія електрона в електричному полі знаходиться з рівняння:

$$\begin{vmatrix} E_2^0 + V_{11} - E & V_{12} & V_{13} & V_{14} \\ V_{21} & E_2^0 + V_{22} - E & V_{23} & V_{24} \\ V_{31} & V_{32} & E_2^0 + V_{33} - E & V_{34} \\ V_{41} & V_{42} & V_{43} & E_2^0 + V_{44} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (2.4)$$

Як зазначено вище, $V_{11} = V_{22} = V_{33} = V_{44} = 0$. Можна також довести, що $V_{13} = V_{14} = V_{31} = V_{41} = 0$. Для прикладу розглянемо матричний елемент:

$$V_{13} = \int \Psi_{200}^* V \Psi_{21,-1} d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} dr r^2 R_{20} R_{21} \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \theta_{1,-1}(\cos \vartheta) \frac{eE}{4\pi} \cos \vartheta \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{-i\varphi} d\varphi.$$

Останній інтеграл по φ дорівнює нулю:

$$\frac{1}{-i} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi} d(-i\varphi) = \frac{1}{-i} (e^{-2\pi} - 1) = \frac{1}{-i} (\cos 2\pi - \sin 2\pi - 1) = 0.$$

тому $V_{13} = 0$. Аналогічно обчислюються матричні елементи V_{14}, V_{31}, V_{41} .

Визначник в рівнянні (2.4) спроститься, тому

$$\begin{vmatrix} E_2^0 - E & V_{12} & 0 & 0 \\ V_{21} & E_2^0 - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2^0 - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2^0 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (2.5)$$

або

$$(E_2^0 - E)^2 \begin{vmatrix} E_2^0 - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2^0 - E \end{vmatrix} = 0. \quad (2.6)$$

Отримуємо чотири корені рівняння (2.6):

$$E_{3,4} = E_2^0, \quad E_{1,2} = E_2^0 \pm |V_{12}|.$$

Електричне поле спричиняє розщеплення енергетичного рівня E_n^0 на три: $E_n^0, E_n^0 + |V_{12}|, E_n^0 - |V_{12}|$. Таке розщеплення проявиться в спектрах поглинання чи випромінювання електромагнітної хвилі атомом водню.

§ 3. Нестационарна теорія збурень

Розглянемо тепер задачу, коли збурення залежить не лише від координат, але і від часу. У цьому випадку енергія не зберігається і в системі не існує стаціонарних станів із заданою величиною енергії. Тому, взагалі кажучи, не виникає потреби пошуку поправок до енергії. Можна визначити поправки до хвильової функції. Отже,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\vec{r}, t), \quad (3.1)$$

де

$$\hat{H}_0 \Psi_n^0 = E_n^0 \Psi_n^0. \quad (3.2)$$

Необхідно знайти наближений розв'язок загального рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.3)$$

Хвильові функції Ψ_n^0 , як власні функції гамільтоніана $\hat{H}_0$, утворюють повну систему функцій. Будь-яку функцію від координат можна розкласти за повною системою функцій. Специфіка задачі полягає в тому, що функція Ψ залежить від часу. Тому необхідно проводити розклад $\Psi(\vec{r}, t)$ на функціях $\Psi_n^0(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r})$ – хвильових функціях стаціонарних станів:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}). \quad (3.4)$$

Підставимо розклад (3.4) в рівняння Шредінгера (3.3) і врахуємо (3.2):

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \left(\dot{C}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} - \frac{i}{\hbar} E_n^0 C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}) \right) &= (\hat{H}_0 + V(\vec{r}, t)) \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}) = \\ &= \sum_n E_n^0 C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}) + V(\vec{r}, t) C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Рівняння (3.5) можна спростити до вигляду:

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}) = \sum_n V(\vec{r}, t) C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} \Psi_n^0(\vec{r}). \quad (3.6)$$

Домножимо (3.6) на Ψ_m^{0*} і проінтегруємо. Використаємо те, що $\int \Psi_m^{0*} \Psi_n^0 d\tau = \delta_{m,n}$. Тоді

$$i\hbar \dot{C}_m(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m^0 t} = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n^0 t} V_{m,n}(t), \quad (3.7)$$

де

$$V_{m,n}(t) = \int \Psi_m^{0*}(\vec{r}) V(\vec{r}, t) \Psi_n^0(\vec{r}) d\tau. \quad (3.8)$$

Рівняння (3.7) можна записати так:

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \omega_{m,n} t} V_{m,n}(t), \quad (3.9)$$

де $\frac{E_m^0 - E_n^0}{\hbar} = \omega_{m,n}$. Диференціальне рівняння (3.9) є точним рівнянням, що аналогічне вихідному рівнянню Шредінгера (3.3). Враховуючи те, що $V(\vec{r}, t)$ є малим збуренням, коефіцієнти $C_m^{(t)}$ можуть бути подані у вигляді ряду:

$$C_m(t) = C_m^0(t) + C_m^{(1)}(t) + C_m^{(2)}(t) + \dots, \quad (3.10)$$

кожен наступний доданок якого є величиною вищого порядку малості. Нагадаємо, що квадрат модуля коефіцієнта розкладу $C_m(t)$ хвильової функції (3.4) задає імовірність реалізації стану з квантовим числом m : $|C_m(t)|^2 = W_m$.

Припустимо, що збурення вмикають в момент часу $t=0$. Нехай до цього часу система знаходилась в стані з хвильовою функцією Ψ_p^0 . Для $t < 0$ коефіцієнти C_m від часу не залежали, тобто $C_m(t) = C_m^0$. Тому $|C_p^0|^2 = 1$, а коли $m \neq p$, $|C_m^0|^2 = 0$. Зазначені умови виконуються, якщо вважати, що $C_m^0 = \delta_{p,m}$.

Розглянемо рівняння (3.9) для станів, які не збігаються з початковим, тобто $m \neq p$. Підставимо $C_m(t)$ з умови (3.10) в рівняння (3.9). Маємо, що

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt}(C_m^0 + C_m^{(1)} + \dots) &= \sum_n (C_n^0 + C_n^{(1)} + \dots) e^{i\omega_{n,m}t} V_{m,n}(t), \\ i\hbar \frac{d}{dt}(C_m^{(1)} + \dots) &= \sum_n (\delta_{p,n} + C_n^{(1)} + \dots) e^{i\omega_{n,m}t} V_{m,n}(t), \end{aligned} \quad (3.11)$$

бо $C_m^0 = 0$, а $C_n^0 = \delta_{p,n}$.

Щоб рівняння (3.11) виконувалось необхідно, щоб величини однакового порядку малості були однакові. Якщо прирівняти величини першого порядку малості, отримаємо:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{C}_m^{(1)}(t) &= \sum_n \delta_{p,n} e^{i\omega_{n,m}t} V_{m,n}(t), \\ i\hbar \dot{C}_m^{(1)}(t) &= e^{i\omega_{m,p}t} V_{m,p}(t). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Повернемося до рівняння (3.10), враховуючи лише величини нульового і першого порядку малості: $C_m(t) = C_m^0 + C_m^{(1)} = 0 + C_m^{(1)}$, бо $m \neq p$. Врахуємо, що $|C_m(t)|^2 = |C_m^{(1)}|^2 = W_{p \rightarrow m}$ задає імовірність перебування системи в стані m в

момент часу t . Але в початковий момент часу $t=0$ система перебувала в стані p , тому $W_{p \rightarrow m}$ буде імовірністю переходу системи з стану p в стан m . Знайдемо коефіцієнти

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{m,p}t'} V_{m,p}(t') dt'. \quad (3.13)$$

Тоді квадрат модуля $|C_m^{(1)}(t)|^2$, тобто імовірність переходу системи з стану p в стан m

$$W_{p \rightarrow m} = |C_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{m,p}t'} V_{m,p}(t') dt' \right|^2. \quad (3.14)$$

Отже, нестационарна теорія збурень використовується тоді, коли гамільтоніан задачі можна подати у вигляді суми деякого нульового гамільтоніану, який є основним доданком, що не залежить явно від часу, і невеликого збурення, яке залежить від координат і часу. Нестационарна теорія збурень дає можливість визначити імовірність переходу системи з деякого стану p , в якому вона перебувала до вмикання збурення, в будь-який інший стан під дією цього збурення. Відповідь можна отримати, використовуючи формулу (3.14). Нестационарна теорія збурень дає можливість побудувати теорію випромінювання або поглинання електромагнітної хвилі квантовою системою.

Приклад 1

Знайдемо імовірність переходу системи з одного стану в інший під дією збурення, яке не залежить від часу.

Нехай в момент часу $t=0$ вмикається стаціонарне збурення $V = V(\vec{r})$ і це збурення діє на систему протягом часу τ .

Запишемо імовірність (3.14):

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau e^{i\omega_{m,p}t'} V_{m,p} dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{m,p}|^2 \left| \int_0^\tau e^{i\omega_{m,p}t'} dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{m,p}|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{m,p}\tau} - 1}{i\omega_{m,p}} \right|^2. \quad (3.15)$$

Розглянемо останній множник у правій частині рівняння (3.15):

$$\begin{aligned} \left| \frac{e^{i\omega_{m,p}\tau} - 1}{i\omega_{m,p}} \right|^2 &= \frac{e^{i\omega_{m,p}\tau} - 1}{i\omega_{m,p}} \frac{e^{i\omega_{m,p}\tau} - 1}{i\omega_{m,p}} = \frac{1 - e^{i\omega_{m,p}\tau} - e^{-i\omega_{m,p}\tau} + 1}{\omega_{m,p}^2} = \frac{2 - 2\cos\omega_{m,p}\tau}{\omega_{m,p}^2} = \\ &= \frac{2(1 - \cos\omega_{m,p}\tau)}{\omega_{m,p}^2} = \frac{4\sin^2 \frac{\omega_{m,p}\tau}{2}}{\omega_{m,p}^2}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Підставимо (3.16) в (3.15). Будемо вважати, що τ досить великий проміжок часу. Тоді

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{m,p}|^2 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{m,p}\tau}{2}}{\left(\frac{\omega_{m,p}}{2} \right)^2}, \quad \tau \rightarrow \infty. \quad (3.17)$$

Згадаємо, що $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 x}{\tau x^2} = \pi \delta(x)$ тому

$$\frac{\sin^2 \frac{\omega_{m,p}\tau}{2}}{\tau \left(\frac{\omega_{m,p}}{2} \right)^2} = \pi \delta \left(\frac{\omega_{m,p}\tau}{2} \right).$$

Отже,

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{m,p}|^2 \tau \pi \delta \left(\frac{\omega_{m,p}\tau}{2} \right), \quad (3.18)$$

$$\text{де } \pi \delta \left(\frac{\omega_{m,p}\tau}{2} \right) = \delta \left(\frac{E_m^0 - E_p^0}{2\hbar} \right).$$

Використаємо відому формулу $\delta(ax) = \frac{1}{a} \delta(x)$. Отже,

$$\delta \left(\frac{E_m^0 - E_p^0}{2\hbar} \right) = 2\hbar \delta(E_m^0 - E_p^0). \quad (3.19)$$

Таким чином, ймовірність переходу системи за час τ , протягом якого на систему діє стаціонарне збурення, дорівнює

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{m,p}|^2 \tau \delta(E_m^0 - E_p^0). \quad (3.20)$$

Ймовірність переходу системи за одиницю часу $W_{p \rightarrow m} = \frac{dW_{p \rightarrow m}}{d\tau}$ задається формулою:

$$w_{p \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{m,p}|^2 \delta(E_m^0 - E_p^0). \quad (3.21)$$

У формулах (3.20) та (3.21) δ -функція Дірака задає закон збереження енергії.

Під дією стаціонарного збурення система може переходити з одного стану в інший лише тоді, коли енергії цих станів однакові, бо має виконуватись закон збереження енергії.

Приклад 2

Розглянемо імовірність переходу системи з одного стану в інший під дією збурення, яке періодично змінюється з часом. Маємо

$$V(\vec{r}, t) = V_0(\vec{r}) e^{\pm i\omega t}. \quad (3.22)$$

Тоді

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau e^{i\omega_{m,p}t'} V_{0m,p} e^{\pm i\omega t'} dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |V_{0m,p}|^2 \left| \int_0^\tau e^{i(\omega_{m,p} \pm \omega)t'} dt' \right|^2.$$

Формули аналогічні до попереднього прикладу. Різниця полягає в тому, що в степені експоненти $\omega_{m,p}$ величину формул (3.15)-(3.18) потрібно замінити на величину $\omega_{m,p} \pm \omega$. Тоді (3.18) переходить у формулу

$$W_{p \rightarrow m} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{m,p}|^2 \tau \pi \delta \left(\frac{\omega_{m,p} \pm \omega}{2} \right), \quad (3.23)$$

де

$$\delta \left(\frac{\omega_{m,p} \pm \omega}{2} \right) = \delta \left(\frac{\frac{E_m^0 - E_p^0}{\hbar} \pm \omega}{2} \right) = \delta \left(\frac{E_m^0 - E_p^0 \pm \hbar \omega}{2\hbar} \right) = 2\hbar \delta(E_m^0 - E_p^0 \pm \hbar \omega).$$

Отже імовірність переходу системи зі стану p в стан m за одиницю часу дорівнює

$$w_{p \rightarrow m} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{0m,p}|^2 \delta(E_m^0 - E_p^0 \pm \hbar \omega). \quad (3.24)$$

Згідно з властивостями δ -функції Дірака, відмінний від нуля результат маємо за умови:

$$E_m^0 - E_p^0 \pm \hbar \omega = 0. \quad (3.25)$$

Проаналізуємо два випадки різних знаків у цій формулі. Якщо $E_m^0 - E_p^0 + \hbar\omega = 0$, то $E_m^0 = E_p^0 - \hbar\omega$, тоді $E_m^0 > E_p^0$ - поглинання кванта $\hbar\omega$. Для іншого знаку перед $\hbar\omega$ отримуємо $E_m^0 = E_p^0 + \hbar\omega$, тобто $E_m^0 < E_p^0$ - випромінювання кванта $\hbar\omega$.

§ 4. Варіаційний метод Рітца

Розглянутий в попередніх параграфах наближений метод розв'язку рівняння Шредінгера (стаціонарна теорія збурень) використовується тоді, коли гамільтоніан від часу не залежить і треба розв'язати стаціонарну задачу:

$$\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n. \quad (4.1)$$

В цього розглянуто інший метод наближеного розв'язку стаціонарного рівняння (4.1). Він отримав назву варіаційного метода Рітца. Зупинимось спочатку на алгоритмі використання варіаційного методу. Нехай нас цікавить енергія і хвильова функція основного стану системи:

$$\hat{H}\Psi_0 = E_0\Psi_0, \quad (4.2)$$

де Ψ_0, E_0 – хвильова функція та енергія основного стану.

Варіаційний метод використовують тоді, коли в гамільтоніані не можна виділити малого доданку і тому не можна використовувати теорію збурень. В цьому підході хвильову функцію основного стану вибирають, виходячи з фізичних міркувань, у вигляді конкретної функції $\varphi_0 = \varphi_0(\vec{r}, \alpha_1, \alpha_2, \dots)$, де α_1, α_2 – варіаційні параметри. При виборі вигляду функції φ_0 враховується те, що вона має бути скінченною, обмеженою, неперервною, нормованою і є такою, щоб інтуїтивно відчувалося, що вона є правильною для розглядуваної квантової системи.

Наступний крок полягає в тому, що потрібно знайти функціонал

$$J_0(\alpha_1, \alpha_2, \dots) = \int \varphi_0^*(\vec{r}, \alpha_1, \alpha_2, \dots) \hat{H} \varphi_0(\vec{r}, \alpha_1, \alpha_2, \dots) d\tau.$$

Далі знаходимо мінімальне значення функції $J(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$. Необхідна умова мінімуму функції багатьох змінних має вигляд:

$$\frac{\partial J_0}{\partial \alpha_1} = 0; \quad \frac{\partial J_0}{\partial \alpha_2} = 0; \dots$$

Звідси знайдемо $\alpha_{1\min}, \alpha_{2\min}, \dots$ а далі визначаємо:

$$J_0(\alpha_{1\min}, \alpha_{2\min}, \dots) = J_{0\min}. \quad (4.3)$$

Можна довести, що $J_{\min} \geq E_0$. У варіаційному методі вважається, що мінімум функціоналу дорівнює енергії основного стану: $J_{\min} = E_0$. Тоді хвильовою функцією основного стану системи вважаємо

$$\varphi_0 \approx \varphi_0(\vec{r}, \alpha_{1\min}, \alpha_{2\min}, \dots). \quad (4.4)$$

Для збудженого стану знову вибираємо пробну функцію $\varphi_1(\vec{r}, \beta_1, \beta_2, \dots)$.

Знаходимо функціонал

$$J_1(\beta_1, \beta_2, \dots) = \int \varphi_1^* \hat{H} \varphi_1 d\tau. \quad (4.5)$$

Розглядувані довільні пробні хвильові функції повинні бути нормовані та ортогональні:

$$\int \varphi_1^* \varphi_1 d\tau = 1, \quad \int \varphi_0^* \varphi_1 d\tau = 0. \quad (4.6)$$

Тоді шукають мінімум функціоналу (4.5) за умов (4.6). Хоч $J_1(\beta_{1\min}, \beta_{2\min}, \dots) \geq E_1$, вважається, що $J(\beta_{1\min}, \beta_{2\min}, \dots) = E_1$ - енергія першого збудженого стану.

Розглянемо міркування, які ведуть до наведеного варіаційного методу. Всупереч поставленій задачі припустимо, що нам відомий розв'язок рівняння (4.1). Будь-яку нормовану функцію можна розкласти за функціями Ψ_n :

$$\Psi = \sum_n C_n \psi_n, \quad (4.7)$$

де $\sum_n |C_n|^2 = 1$, бо $\int |\psi_n|^2 d\tau = 1$.

На хвильовій функції Ψ знайдемо середнє значення енергії у цьому стані. Одержимо, що

$$\begin{aligned} \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau &= \bar{E}, \quad \int \sum_n C_n^* \psi_n^* \hat{H} \sum_m C_m \psi_m d\tau = \bar{E}, \\ \sum_{n,m} \int E_m C_n^* C_m \psi_n^* \psi_m d\tau &= \bar{E}. \end{aligned}$$

Врахуємо ортонормованість функцій ψ_n :

$$\sum_{n,m} C_n^* C_m E_m \delta_{n,m} = E, \quad E = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |C_n|^2, \quad (4.8)$$

де

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots \quad (4.9)$$

З умов (4.8) і (4.9) видно, що мінімальне значення $\sum_{n=0}^{\infty} E_n |C_n|^2$ буде тоді, якщо вважати, що $E_1 = E_2 = E_3 = \dots = E_0$. Тоді отримуємо з (4.8), що

$$\sum_n E_0 |C_n|^2 \leq \bar{E}, \quad \text{або} \quad E_0 \sum_n |C_n|^2 \leq \bar{E}. \quad (4.10)$$

Сума всіх значень $|C_n|^2$ дорівнює одиниці, тому

$$E_0 \leq \bar{A} = \int \Psi^* \hat{H} \Psi d\tau. \quad (4.11)$$

Отже, якщо підставимо в (4.1) пробну функцію φ_0 і обчислимо функціонал J_0 згідно з рівнянням (4.3), то цей функціонал буде більший/рівний за енергію основного стану системи.

§ 5. Квазікласичне наближення

В класичній механіці рух матеріальної точки в полі потенціальних сил можна описувати рівняннями Ньютона, Лагранжа, Гамільтона. Крім цих рівнянь для опису руху точки існує рівняння Гамільтона-Якобі

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m_0} + U(\vec{r}), \quad (5.1)$$

яке є нелінійним диференціальним рівнянням в частинних похідних першого порядку від дійсної функції дії. Остання визначається через функцію Лагранжа (L) за допомогою інтеграла

$$S(\vec{r}, t) = \int_{t_0}^t L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, \tau) d\tau$$

Для співставлення рівнянь квантової та класичної механіки виберемо хвильову функцію Ψ у вигляді

$$\Psi = A e^{\frac{i}{\hbar} S(\vec{r}, t)} \quad (5.2)$$

підставимо у рівняння Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} + U(\vec{r}) \right] \Psi . \quad (5.3)$$

Після обчислення похідних та відповідних спрощень отримуємо компактне рівняння для функції дії $S(\vec{r}, t)$:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{(\nabla S)^2}{2m_0} + U(\vec{r}) - \frac{i\hbar}{2m_0} \nabla^2 S . \quad (5.4)$$

У стаціонарних станах енергія системи має визначене значення, а залежність хвильової функції від часу визначається енергією:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) .$$

Тому для стаціонарних станів у функції (5.2) можна виділити явним чином залежність від часу, вважаючи, що

$$S(\vec{r}, t) = S_0(\vec{r}) - Et .$$

Беручи до уваги вигляд оператора імпульсу $\hat{p} = -i\hbar \nabla$, отримуємо

$$\hat{p}\Psi = (\nabla S)\Psi \equiv \vec{p}\Psi . \quad (5.5)$$

З вигляду рівняння (5.5) видно, що імпульс частинки

$$\vec{p} = \nabla S \equiv \text{grad} S \quad (5.6)$$

визначається таким же рівнянням, як у класичній механіці. Траєкторія руху частинки в класичній механіці нормальна до поверхні однакових значень функції дії.

Порівнюємо тепер рівняння Гамільтона-Якобі (5.1) та рівняння (5.4), яке є перетвореним рівнянням Шредингера. Видно, щоб з (5.4) отримати класичне рівняння Гамільтона-Якобі, ми повинні знехтувати останнім доданком у правій частині рівняння. При $\hbar = 0$ квантове рівняння точно переходить в класичне. Якщо ж $\hbar \neq 0$, то при виконанні умови

$$(\nabla S)^2 \gg \hbar |\nabla^2 S| \quad (5.7)$$

квантові доданки спричиняють невеликі поправки до класичного рівняння. Відповідне наближення називають квазікласичним. Якщо врахувати рівняння (5.6), то умова (5.7) набуде вигляду

$$\frac{\hbar}{p^2} |\text{div } \vec{p}| \ll 1 . \quad (5.8)$$

Зокрема, для одновимірного випадку маємо

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| = \left| \frac{d(\hbar/p)}{dx} \right| = \left| \frac{d\lambda}{2\pi dx} \right| \ll 1. \quad (5.9)$$

З (5.9) видно, що квазікласичне наближення є досить точним тоді, коли довжина хвилі де Бройля постійна або досить повільно змінюється в просторі.

Розглянемо конкретний приклад. Врахуємо, що $p = \sqrt{2m_0[E - U(x)]}$. Тоді

$$\frac{\hbar}{p^2} \left| \frac{dp}{dx} \right| = \left| \frac{m_0 F \hbar}{p^3} \right| \ll 1, \quad (5.10)$$

де $F = -\frac{dU}{dx}$ - класична сила, що діє на частинку у потенціальному полі.

З умови (5.10) можна зробити висновок, що квазікласичне наближення стає неприйнятним при малих значеннях імпульсу частинки. Зокрема, воно не є справедливим в тих точках, в яких за класичною теорією частинка повинна зупинитись (класичні точки повороту), а саме при $E = U$. Така ситуація реалізується, наприклад, у випадку перебування частинки в потенціальній ямі. Все це нескладно пояснити, якщо врахувати, що при $p \rightarrow 0$ довжина хвилі де Бройля прямує до безмежності, а тоді хвильові властивості частинки будуть проявлятися значно сильніше.

Якщо умова (5.10) виконується, то можна розвинути наближений метод розв'язку квантово-механічних задач, що ґрунтується на врахуванні поправок до класичного опису. Цей метод іноді називають квазікласичним наближенням або методом Вентцеля-Крамерса-Брілюена (метод ВКБ).

Розглянемо стаціонарну задачу для частинки в потенціальному полі. Тоді

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{r})} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) = \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (5.11)$$

а (5.4) перетвориться в рівняння:

$$\frac{(\nabla S_0)^2}{2m_0} + U(\vec{r}) - E - \frac{i\hbar \nabla^2 S_0}{2m_0} = 0. \quad (5.12)$$

Для стаціонарної задачі квазікласичне наближення полягає в наближеному розв'язку квантового рівняння (5.12) для редукованої функції дії $S_0(\vec{r})$, яка

визначає хвильову функцію стаціонарних станів (5.11). Розв'язок рівняння (5.12) шукають, згідно з методом ВКБ, у вигляді ряду:

$$S_0 = S_0^{(0)} + \frac{\hbar}{i} S_0^{(1)} + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_0^{(2)} + \dots \quad (5.13)$$

Якщо умова квазікласичності (5.10) виконується, то кожен наступний доданок в (5.13) буде значно меншим за попередній і тому при розв'язку (5.12) можна використати метод послідовних наближень.

Підставимо (5.13) в (5.12) і прирівняємо коефіцієнти при однакових степенях $\hbar$. Отримаємо систему взаємозв'язаних рівнянь

$$\begin{aligned} (\nabla S_0^{(0)})^2 + 2m_0[U(\vec{r}) - E] &= 0, \\ \nabla S_0^{(1)} \nabla S_0^{(0)} + \frac{1}{2} \nabla^2 S_0^{(0)} &= 0, \\ (\nabla S_0^{(1)})^2 + 2\nabla S_0^{(0)} \nabla S_0^{(2)} + \nabla^2 S_0^{(1)} &= 0, \dots \end{aligned} \quad (5.14)$$

Розв'язавши перше рівняння (5.14), можна визначити $S_0^{(0)}$. Функція $S_0^{(1)}$ є розв'язком другого рівняння і т.д. Найчастіше обмежуються першими двома доданками ряду (5.13).

Для прикладу розглянемо одновимірну задачу. Оператор ∇ стане оператором похідної по x , яку надалі позначимо штрихом. Рівняння (5.14) запишуться у вигляді:

$$\begin{aligned} (S_0^{(0)'})^2 &= p^2(x), \\ 2S_0^{(1)'} &= -\frac{S_0^{(0)''}}{S_0^{(0)'}} \quad (5.15) \\ 2S_0^{(2)'} &= \frac{S_0^{(1)''} + (S_0^{(1)'})^2}{S_0^{(0)'}} \dots \end{aligned}$$

З першого рівняння маємо

$$S_0^{(0)'} = \pm p(x) = \pm \sqrt{2m_0[E - U(x)]} = \pm \hbar k(x). \quad (5.16)$$

З врахуванням (5.16) друге рівняння зведеться до простого диференціального рівняння першого порядку

$$S_0^{(1)'} = -\frac{p'(x)}{2p(x)},$$

розв'язок якого

$$S_0^{(1)} = -\ln \sqrt{p(x)} + \ln C. \quad (5.17)$$

Нехай потенціальна енергія, що є плавною функцією від x , має зображений на рис. 1 вигляд.

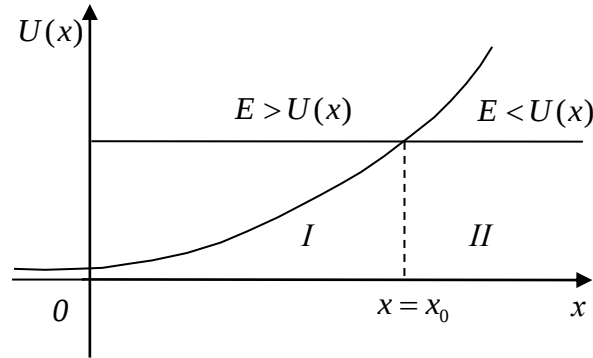


Рис. 1. Потенціальна енергія частинки.

Для частинки з енергією E (див. рис. 1) весь проміжок зміни x можна розділити на дві області. Коли $x < x_0$, то енергія E більша за потенціальну енергію $U(x)$ - область I. У другій області ($x > x_0$), навпаки, $E < U(x)$.

З рівняння (5.16) знаходимо, що

$$S_0^{(0)} = \pm \int_x^{x_0} p(x') dx'. \quad (5.18)$$

Обмежуючись в ряді (5.13) членами порядку $\hbar$, отримаємо

$$S_0 = S_0^{(0)} + S_0^{(1)} = \pm \int_x^{x_0} p(x') dx' + i\hbar \ln \sqrt{p(x)} + \frac{\hbar}{i} \ln C. \quad (5.19)$$

Щоб записати загальний вигляд хвильової функції частинки в квазікласичному наближенні для $x < x_0$ підставимо (5.19) в (5.11).

$$\Psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} \exp \left\{ i \int_x^{x_0} k(x') dx' \right\} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} \exp \left\{ -i \int_x^{x_0} k(x') dx' \right\}. \quad (5.20)$$

Область I називають класично дозволеною областю руху частинки в цій області; $k(x)$ є дійсною функцією, а $\hbar k(x) = p(x)$ є імпульсом частинки, який залежить від її координати. В цій області хвильову функцію можна ще записати через тригонометричні функції синуса і косинуса

$$\Psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p}} \sin \left\{ \int_x^{x_0} k(x') dx' + \alpha \right\}, \quad (5.21)$$

де A та α – невідомі сталі. Амплітуда хвильової функції (5.21) обернено пропорційна $\sqrt{p}$. Отже, ймовірність знайти частинку в малому елементі об'єму буде обернено пропорційною імпульсу (швидкості частинки).

Значення координати x_0 , при якому $E = U(x)$, називають точкою повороту. В такій точці простору класична частинка зупиняється, бо імпульс $p(x_0) = 0$, а далі частинка рухається назад. Хвильова функція $\Psi(x)$ характеризується наступною властивістю:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \Psi(x) = \infty.$$

Ця розбіжність пов'язана з тією обставиною, що при малих значеннях імпульсу квазікласичне наближення (5.20), (5.21) для хвильової функції частинки не застосовне.

Визначимо відстань $x_0 - x$, на якій неможна використовувати квазікласичне наближення. Розкладемо потенціальну енергію $U(x)$ в точці $x_0 = x$. Тоді

$$\begin{aligned} p^2 &= 2m_0 [E - U(x)] \approx 2m_0 \left[E - U(x_0) - \frac{dU}{dx} (x - x_0) \right] = \\ &= 2m_0 \left| \frac{dU}{dx} \right| (x_0 - x), \\ p^3 &= \left\{ 2m_0 \left| \frac{dU}{dx} \right| \right\}^{3/2} (x_0 - x)^{3/2}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Нерівність (5.10) за умови (5.22) перетвориться до такої:

$$\begin{aligned} \left\{ 2m_0 \left| \frac{dU}{dx} \right| \right\}^{3/2} (x_0 - x)^{3/2} &\square m_0 \left| \frac{dU}{dx} \right| \hbar, \\ |x_0 - x| &\square \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m_0 \left| \frac{dU}{dx} \right|} \right)^{1/3}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Останню умову можна спростити:

$$x_0 - x \approx \frac{\hbar}{2p} = \frac{\lambda}{4\pi}. \quad (5.23')$$

де λ – хвиля де Бройля, що відповідає значенню імпульса в точці x .

Область II, коли $E < U(x)$, називається класично недоступною областю для частинки. В цій області $K(x)$ є уявною функцією:

$$K(x) = i\chi(x) = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m_0[U(x) - E]}.$$

Введемо також величину

$$|p| = \hbar\chi(x) = \sqrt{2m_0(U(x) - E)}.$$

Тоді в області $x > x_0$ хвильова функція частинки

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \left[D \exp\left(-\int_x^{x_0} \chi(x') dx'\right) + \varepsilon \exp\left(\int_x^{x_0} \chi(x') dx'\right) \right].$$

Якщо в задачі x може бути як завгодно великою координатою, то для того, щоб хвильова функція була обмеженою, необхідно вважати, що коефіцієнт $\varepsilon = 0$.

Практичне використання функцій (5.21) та (5.24) можливе лише тоді, коли відомий зв'язок осцилюючого розв'язку (5.21) з експоненціальним (5.24) в точці класичного повороту (x_0). В малій області $a \leq x \leq b$, що має розмір

$\hbar^{2/3} / \left(m_0 \left| \frac{dU}{dx} \right|^{1/3} \right)$ і охоплює точку повороту, не можна використовувати

квазікласичне наближення і необхідно точно розв'язати одномірне рівняння Шредінгера. Зв'язок між розв'язками (5.21) і (5.24) знаходимо з умов неперервності переходу осцилюючого розв'язку в точці $x = a$ в точний розв'язок, а в точці $x = b$ в експоненціальний розв'язок.

§ 6. Частинка в потенціальній ямі довільної форми

В якості прикладу використання квазікласичного наближення розглянемо задачу про визначення енергії та хвильової функції частинки, що перебуває в потенціальній ямі будь-якої, але гладкої форми (рис. 2).

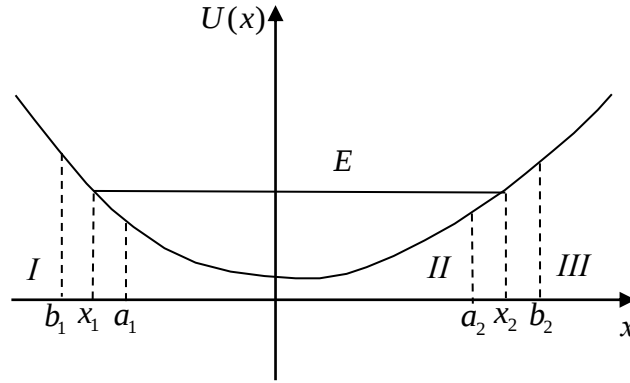


Рис. 2. Потенціальна енергія частинки

Видно, що існує дві точки повороту, які визначаються з умови $U(x) = E$. Біля точок повороту x_1 і x_2 виділимо відповідно області $b_1 \leq x \leq a_1$ та $b_2 \leq x \leq a_2$, де квазікласичне наближення не можна використовувати. За межами цих областей використовуємо квазікласичне наближення.

Експоненціально спадні хвильові функції при віддаленні від точок повороту мають вигляд:

$$\Psi_I(x) = \frac{D}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_x^{x_1} \chi(x') dx'\right), \quad x < b_1 \quad (6.1)$$

$$\Psi_{III}(x) = \frac{\varepsilon}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_{x_2}^x \chi(x') dx'\right), \quad x < b_2 \quad (6.2)$$

Осцилюючий розв'язок можна записати у вигляді (див. (5.21)):

$$\Psi_{II}(x) = \frac{A}{\sqrt{|p|}} \sin\left(-\int_{x_1}^{x_2} k(x') dx' + \alpha\right), \quad a_1 \leq x \leq a_2 \quad (6.3)$$

В областях $x \in [b_1, a_1]$, $x \in [b_2, a_2]$ квазікласичне наближення несправедливе і виникає необхідність розв'язувати рівняння Шредінгера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right] \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (6.4)$$

або

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + k^2(x) \Psi(x) = 0, \quad \text{де } k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - U(x)).$$

Проаналізуємо розв'язок рівняння в області $x \in [b_2, a_2]$. Зважаючи на те, що відстань $b_2 - a_2$ є малою, розкладемо потенціальну енергію в т. $x = x_2$

$$U(x) = U(x_2) + \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_2} (x - x_2) = E - F(x_2 - x), \quad (6.5)$$

де $F = \left(\frac{dU}{dx} \right)_{x=x_2}$.

Рівняння Шредінгера (6.4) з врахуванням (6.5) зведеться до такого співвідношення:

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2 \Psi(x - x_2)}{dx^2} + F(x_2 - x) \Psi(x - x_2) = 0$$

Розв'язком цього рівняння є функція Айрі, тобто

$$\Psi(x - x_2) = A(u) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \cos\left(zu + \frac{z^3}{3}\right) dz,$$

де

$$U = \left(\frac{2m_0 F}{\hbar^2} \right)^{1/3} (x - x_2). \quad (6.6)$$

Згідно з (5.23) межа області, в якій можна скористатись розв'язком (6.6), визначається умовою

$$|x - x_2| \ll \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m_0 \frac{dU}{dx}} \right)^{1/3}, \text{ або } |U| \ll 1.$$

Нам необхідно знати розв'язок (6.6) на межі області, тому хвильову функцію $\Psi(u)$ запишемо з врахуванням асимптотичного значення функцій Айрі (функцій Беселя). Знаючи, що

$$A(u) = \begin{cases} K_{1/3}, & \text{якщо } u > 0 \\ \frac{1}{3} \sqrt{\pi u} \left\{ J_{1/3} \left(\frac{2}{3} u^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} u^{3/2} \right) \right\}, & \text{якщо } u < 0 \end{cases}$$

Для великих значень аргументу u хвильової функції отримаємо:

$$\Psi(u) \approx A(u) = \begin{cases} \frac{1}{2} u^{-1/4} e^{-2/3 u^{3/2}} & \text{при } u \gg 1 \\ |u|^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3}|u|^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } u \approx -1. \end{cases} \quad (6.7)$$

Якщо $x > x_2$, то

$$\chi(x) = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(U(x) - E)} = \sqrt{\frac{2m_0 F}{\hbar^2}(x - x_2)},$$

а тоді

$$\frac{2}{3} u^{3/2} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2m_0 F}{\hbar^2}(x - x_2)} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2m_0 F}{\hbar^2}} \int_{x_2}^x (x' - x_2)^{1/2} dx' \int_{x_2}^x \chi(x') dx'. \quad (6.8)$$

Коли ж $x < x_2$, то

$$k(x) = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}(E - U(x))} = \sqrt{\frac{2m_0 F}{\hbar^2}(x_2 - x)},$$

тому

$$\frac{2}{3} |u|^{3/2} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2m_0 F}{\hbar^2}(x - x_2)^{3/2}} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{2m_0 F}{\hbar^2}} \int_x^{x_2} (x_2 - x')^{1/2} dx' \int_x^{x_2} k(x') dx'. \quad (6.9)$$

Хвильову функцію біля меж області $x \in [a_2, b_2]$ можна отримати, якщо підставити (6.8) та (6.9) в (6.7). Врахуємо також те, що

$$p = \sqrt{2m_0(E - U(x))} = \sqrt{2m_0 F(x_2 - x)}, \text{ тому } |u|^{-1/2} = \frac{(2m_0 F \hbar)^{1/6}}{\sqrt{p}}.$$

Отже, розв'язок рівняння (6.5) для $x \in [a_2, b_2]$ можна подати у вигляді:

$$\Psi(x) = \frac{B}{2\sqrt{|p|}} \exp\left(-\int_{x_2}^x \chi(x') dx'\right), \text{ якщо } x \approx b_2; \quad (6.10)$$

$$\Psi(x) = \frac{B}{\sqrt{|p|}} \sin\left(\int_x^{x_2} k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right), \text{ якщо } x \approx a_2, \quad (6.11)$$

Де знак « x » означає окіл біля точок a_2 та b_2 .

Порівняємо (6.10) з (6.2) та (6.11) з (6.3) для визначення співвідношень між коефіцієнтами нормування:

$$B = 2\varepsilon, B = A, \alpha = \frac{\pi}{4}. \quad (6.12)$$

Ми провели зшивання розв'язків в особливих точках $x = a_2$ та $x = b_2$. Проведемо аналогічну процедуру в інших точках простору $x = a_1$ та $x = b_1$. Розв'язки рівняння Шредінгера (6.4) біля цих точок можна визначити з рівнянь (6.10) та (6.11) заміною змінної інтегрування: $x' \rightarrow -x'$ та межі інтегрування $x_2 \rightarrow x_1$. Тоді в околі меж області $x \in [b_1, a_1]$ маємо:

$$\Psi(x) = \frac{k}{2|p|} \exp\left(-\int_x^{x_1} \chi(x') dx'\right), \text{ для } x \approx b_1; \quad (6.13)$$

$$\Psi(x) = \frac{k}{|p|} \sin\left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{2}\right), \text{ для } x \approx a_1, \quad (6.14)$$

Повернемось до хвильової функції (6.3), визначеної для $x \in [a_1, a_2]$. Порівнюючи її з функцією (6.14), що визначена в області $x \in [b_1, a_1]$

$$\begin{aligned} \Psi_{II}(x) &= \frac{A}{\sqrt{|p|}} \sin\left(\int_x^{x_2} k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) = -\frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_{x_2}^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= -\frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2} + \int_{x_2}^{x_1} k(x') dx'\right) = -\frac{A}{\sqrt{p}} \sin\left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} + \beta\right). \end{aligned} \quad (6.15)$$

У формулі (6.15) при необхідному переході у фазі синуса від інтегралу $\int_x^{x_2} k(x') dx'$ до інтегралу $\int_{x_1}^x k(x') dx'$ виник інтеграл $\int_{x_2}^{x_1} k(x') dx'$, межами якого є класичні точки повороту частинки при її русі в потенціальному полі. Бачимо, що

$$\int_{x_2}^{x_1} k(x') dx' = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (6.17)$$

Введемо інтеграл по замкненій фазовій траєкторії частинки

$$\oint p dx = \hbar \int_{x_1}^{x_2} k(x') dx' + \hbar \int_{x_2}^{x_1} k(x) dx = 2 \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx,$$

Тобто інтеграл по всьому періоду її класичного руху. Тоді умова (6.170) запишеться у вигляді відомої формули

$$\oint p(x) dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (6.18)$$

яка задає правило квантування Бора-Зомерфельда. З цієї умови можна визначити енергію частинки в потенціальному полі.

Варто ще раз проаналізувати хвильову функцію частинки. Ми встановили, що в межах області $x \in [x_1, x_2]$ хвильова функція є осцилюючою

$$\Psi(x) = \frac{k}{\sqrt{p}} \sin \left(\int_{x_1}^x k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right), \quad (6.19)$$

а за межами класичних точок повороту спадає за експоненціальним законом. Проаналізуємо залежність хвильової функції (6.19) від координати x при зміні x від x_1 до x_2 . Мінімальне значення фази синуса функції (6.19) при $x = x_1$

дорівнює $\frac{\pi}{4}$, а максимальне згідно з (6.17) - $\pi(n + \frac{3}{4})$. На інтервалі $x \in [x_1, x_2]$

хвильова функція n разів дорівнює нулю – має n вузлів. Згідно з умовою (5.23') наближення ВКБ справедливе на більшій відстані, ніж довжина де Бройлівської хвилі частинки. Для використання квазікласичного наближення необхідно, щоб довжина хвилі частинки була значно меншою за відстань між класичним точками повороту, тобто

$$\lambda \ll x_2 - x_1.$$

З (6.18) видно, що зазначена нерівність виконується для великих імпульсів a , отже, для великих квантових чисел n . Це ще одна умова застосовності квазікласичного наближення.

Хвильову функцію (6.19) можна нормувати на відрізьку $[x_1, x_2]$. Нехай

$$\int_{x_1}^{x_2} \Psi^2(x) dx = 1. \quad (6.20)$$

Підставивши (6.19) в умову (6.20) та врахувавши, що $\Psi(x)$ є швидко осцилюючою функцією, отримаємо:

$$k^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{p(x)} \sin^2 \left(\int_{x_1}^{x_2} k(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right) dx \cong \frac{k^2}{2} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p(x)}. \quad (6.21)$$

Час руху частинки від точки від x_1 до точки x_2 , що дорівнює півперіоду коливань

$$\frac{T}{2} = \int_{t_1}^{t_2} dt = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\frac{dx}{dt}} = m_0 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p(x)}. \quad (6.22)$$

Підставимо (6.22) в рівняння (6.21) та виразимо період коливань через циклічну частоту коливань частинки $\omega = \frac{2\pi}{T}$:

$$\frac{k^2}{2m_0} m_0 = \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p(x)} = \frac{k^2}{2m_0} \frac{T}{2} = \frac{k^2}{4m_0} \frac{2\pi}{\omega} = 1. \quad (6.23)$$

Нормована хвильова функція частинки в квазікласичному наближенні має вигляд:

$$\Psi(x) = \left(\frac{2m_0\omega}{\pi p} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.24)$$

Формули (6.18), (6.24) можна використати для простого розв'язку задач з конкретним виглядом функції потенціальної енергії. Зокрема, для розв'язку задачі про визначення енергії лінійного осцилятора, обчислення коефіцієнта проходження бар'єра довільної форми та ін.

Приклади розв'язування задач

Задача 1. На частинку масою m_0 , що знаходиться в нескінченно глибокій потенціальній ямі шириною a , накладено мале збурення $\hat{V}(x) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$ (де a і V_0 – сталі величини). Визначити поправки до енергії стаціонарних станів з точністю до другого порядку включно.

Розв'язування

Власні функції і власні значення енергії незбуреного гамільтоніана для частинки в нескінченно глибокій потенційній ямі записуються так:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x; \quad E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_0 a^2}.$$

Для обчислення поправок до енергії за рахунок стаціонарного збурення знайдемо матричні елементи оператора $\hat{V}(x) = V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$:

$$V_{mn} = \int_0^a \psi_m^*(x) \hat{V} \psi_n(x) dx = \frac{2V_0}{a} \int_0^a \sin \frac{m\pi}{a} x \cdot \cos \frac{2\pi}{a} x \cdot \sin \frac{n\pi}{a} x dx.$$

Звідки

$$V_{mn} = \frac{V_0}{2} [\delta_{m,n+2} + \delta_{m,n-2}].$$

Отже, поправка до енергії у першому порядку теорії збурень дорівнює нулю:

$$E_n^1 = V_{nn} = 0,$$

а в другому порядку –

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}},$$

$$E_n^{(2)} = \frac{V_0^2}{2E_1^{(0)}} \frac{1}{n^2 - 4} \text{ при } n \neq 2.$$

Задача 2. Знайти поправку до енергії основного стану лінійного гармонійного осцилятора за рахунок ангармонічних доданків у потенціальній енергії $V(x) = \alpha x^3 + \beta x^4$ (α і β – сталі величини).

Розв'язування

У першому наближенні теорії збурень поправка до енергії гармонійного осцилятора виражається формулою:

$$E^{(1)} = \beta (x^4)_{nn},$$

оскільки

$$(x^3)_{nn} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n^{(0)}|^2 x^3 dx = 0$$

(через непарність підінтегральної функції).

Користуючись правилом множення матриць та враховуючи вираз

$$x_{n,m} = \sqrt{\frac{\hbar n}{2m_0\omega}} \delta_{n,m+1}$$

для матричних елементів координати, отримаємо:

$$E_n^{(1)} = \beta (x^4)_{nn} = \beta \sum_{klm} x_{nk} x_{kl} x_{lm} x_{mn} = \frac{3}{2} \beta \frac{\hbar^2}{m_0^2 \omega^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right).$$

Поправка до енергії в другому порядку від першого доданку αx^3 потенціалу збурення виражається формулою

$$E_n^{(2)} = \frac{\alpha^2}{\hbar\omega} \sum_{k \neq n} \frac{\left| (x^3)_{nk} \right|^2}{n-k} = -\frac{15}{4} \alpha^2 \frac{\hbar^2}{m_0^3 \omega^4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right).$$

Для поправки до енергії основного стану ($n=0$) гармонічного осцилятора маємо:

$$\Delta E = \frac{3}{4} \frac{\hbar^2}{m_0^2 \omega^2} \left(\beta - \frac{11}{6} \frac{\alpha^2}{m_0 \omega^2} \right).$$

Задача 3. Визначити наближено за допомогою варіаційного методу енергію основного стану частинки в потенціальному полі $U(x) = U_0 x^4$ ($U_0 = \text{const}$). В

якості пробної функції використати функцію $\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\beta^2}}$.

Розв'язування

Енергія основного стану буде мінімумом функціоналу:

$$\bar{E} \equiv I(\psi) = \int \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx.$$

Так як нормованою з даного класу допустимих функцій є функція

$$\psi(x) = \left(\sqrt{\pi} \beta \right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{2\beta^2}}$$

і гамільтоніан має вигляд

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + U_0 x^4,$$

то для $\bar{E}$ маємо:

$$\bar{E} = \frac{\hbar^2}{4m_0 \beta^2} + \frac{3}{4} U_0 \beta^4.$$

З умови мінімуму $\bar{E}$ знаходимо:

$$\beta_{\min}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{6m_0 U_0^2} \right)^{\frac{1}{3}},$$

$$E_0 = (\bar{E})_{\min} = \frac{3}{4} \left(\frac{3 U_0 \hbar^4}{4 m_0^2} \right)^{\frac{1}{3}}.$$

Задачі для самостійного опрацювання

1. Одержати наближений вираз для енергетичного зсуву основного стану атома водню, який обумовлений скінченими розмірами протона, припускаючи, що протон є рівномірно зарядженою по об'єму кулею радіусом $R = 10^{-15}$ м.
2. Тривимірний гармонійний осцилятор із зарядом e і $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3$ знаходиться в слабкому магнітному полі. Знайти розщеплення найнижчого виродженого енергетичного рівня з квантовим числом $m = 1$.
3. На одновимірний гармонійний осцилятор із зарядом e діє електричне поле з напруженістю $\vec{\mathcal{E}}$, яка напрямлена вздовж осі OX . Знайти зміну енергії стаціонарних станів у другому наближенні теорії збурень. Порівняти точне значення енергії з наближенням.
4. Визначити поправку до енергії основного воднево-подібного стану донорного електрона, що зумовлена екрануванням потенціалу взаємодії вільними носіями заряду. Потенціальна енергія донорного електрона визначається формулою $U(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon'r} e^{-\chi r}$ ($\frac{1}{\chi}$ дебаївський радіус екранування, ϵ' - відносна діелектрична проникність).
5. Знайти поправку до рівнів енергії атома водню за рахунок релятивістської залежності маси від швидкості. Врахувати, що член порядку v^2/c^2 у релятивістській формулі залежності $m(v)$ приводить до оператора збурення $\hat{V}_r = -\frac{1}{8m_0^3c^2} \hat{p}^4$ ($\hat{p}$ - оператор імпульсу).
6. У площині XOY обертається твердий ротатор з моментом інерції J та електричним дипольним моментом $\vec{D}$. Дослідити вплив на рівні енергії ротатора однорідного електричного поля з напруженістю $\vec{\mathcal{E}}$, яке напрямлене вздовж осі OX .
7. Визначити хвильові функції в першому наближенні теорії збурень плоского ротатора в слабкому електричному полі (див. попередню задачу). Знайти також імовірності різних орієнтації диполя стосовно електричного поля.

8. Просторовий ротатор з моментом інерції I та електричним дипольним моментом $\vec{D}$ поміщений в однорідне електричне поле $\vec{\mathcal{E}}$. Розглядаючи електричне поле як збурення, знайти першу відмінну від нуля поправку до енергії основного стану ротатора.
9. Атом водню знаходиться в однорідному електричному полі з напруженістю $\vec{\mathcal{E}}$, що напрямлене вздовж осі OZ . Знайти розщеплення рівня енергії, що характеризуються головним квантовим числом $n=2$ (ефект Штарка).
10. Для двократно виродженого енергетичного рівня визначити поправку першого порядку до енергії і правильні функції нульового наближення, якщо оператор енергії збурення $\hat{V}$ не залежить від часу.
11. Плоский заряджений ротатор поміщений в однорідне магнітне поле, індукція $\vec{B}$ якого є перпендикулярною до площини обертання. Застосовуючи теорію збурень, знайти в першому наближенні енергію і хвильові функції стаціонарних станів. Заряд ротатора e , маса m_0 .
12. Частинка без спіна, що рухається в сферично-симетричному полі, знаходиться в однорідному магнітному полі з індукцією $\vec{B}$, що паралельна осі OZ . Знайти власні значення енергії і хвильові функції в першому наближенні теорії збурень. Оператор енергії збурення вважати рівним $i \frac{e\hbar}{m_0} \vec{A} \vec{\nabla}$ ($\vec{A}$ – векторний потенціал, m_0 – маса частинки).
13. Одержати формулу для власних значень енергії f -кратно виродженого рівня в другому наближенні теорії збурень для випадку, коли матричні елементи на вироджених хвильових функціях станів дорівнюють нулю.
14. Незбурена система має два близьких енергетичних рівні, інтервал між якими порівняний з матричним елементом оператора збурення між цими станами. Знайти збурення до енергії в першому наближенні.
15. Зсув енергетичного рівня основного стану атома водню (ефект Штарка) в слабкому полі $\vec{\mathcal{E}}$ визначається виразом $\Delta\mathcal{E} = -\frac{1}{2} \alpha \varepsilon_0 \mathcal{E}^2$ (α – поляризованість атома). Використовуючи теорію збурень, оцініть межі зміни поляризованості атома водню в основному стані.

16. Користуючись прямим варіаційним методом, знайти енергію основного стану частинки в полі з потенціальною енергією $U(x) = \frac{m_0 \omega_0^2}{2} x^2$ (одномірний гармонійний осцилятор). Вибрати наступні пробні функції:

$$\text{а) } \psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\beta^2}};$$

$$\text{б) } \psi(x) = A(1 + \alpha|x|)e^{-\alpha|x|}.$$

17. Застосовуючи прямий варіаційний метод, знайти мінімальну енергію тривимірного гармонійного осцилятора, що має потенціальну енергію

$$U(r) = \frac{1}{2} m_0 \omega^2 r^2 \quad (r - \text{відстань частинки від положення рівноваги}).$$

У якості пробних вибрати функції у вигляді $\psi(r) = A(1 + \alpha r)e^{-\alpha r}$ (α – варіаційний параметр).

18. Визначити енергію основного стану дейтона, якщо взаємодія протона з нейтроном залежить від відстані r між ними і характеризується потенціальною енергією $U(r) = -U_0 e^{-\frac{r}{a}}$ ($U_0 \approx 25$ Мев, $a \approx 2 \cdot 10^{-15}$ м).

Розглянути пробну функцію $\psi(r) = A e^{-\frac{\alpha r}{2a}}$, що залежить від одного варіаційного параметра α (A – стала нормування).

19. Порівняти енергію основного стану воднево-подібного атома, обчислену варіаційним методом з використанням пробної функції $\psi(r) = A(1 + \alpha)e^{-\alpha r}$, з точним значенням $E_n = -13,6 Z^2$ еВ.

20. Варіаційним методом визначити енергію основного стану двоелектронної системи, що знаходиться в полі ядра з зарядом Ze_0 . Як пробну функцію розглянути добуток воднево-подібних функцій з ефективним зарядом $Z'e_0$: $\psi(r_1, r_2) = C \exp\left(-\frac{Z'(r_1 + r_2)}{a_0}\right)$.

21. Використовуючи результат попередньої задачі, знайти потенціали іонізації нейтрального атома гелію й іона літію Li^+ .

22. Застосувати квазікласичний метод до знаходження енергетичного спектра частинки масою m_0 , що рухається в полі з потенціальною енергією

$$U(x) = -U_0 \left(1 - \frac{|x|}{a} \right) \text{ при } E < 0.$$

23. Визначити квазікласичні рівні енергії в полі з потенціальною енергією

$$U(x) = U_0 \operatorname{ctg}^2 \frac{\pi x}{a}.$$

24. Розрахувати енергетичний спектр воднево-подібного атома, використовуючи квазікласичне наближення.

25. Для частинки в потенціальному полі $U(x) = -U_0 ch^2 \frac{x}{a}$ визначити в квазікласичному наближенні енергетичний спектр і повне число дискретних рівнів.

26. Визначити в квазікласичному наближенні число дискретних енергетичних рівнів частинки, що рухається в центральносиметричному полі з потенціальною енергією $U(r)$.

27. Використовуючи метод квазікласичного наближення, показати, що правила квантування для частинки, що знаходиться в довільній одновимірній потенціальній ямі, з точністю до членів порядку $\hbar$ представляються співвідношеннями $\oint p dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$, (де $n = 0, 1, 2, \dots$).

28. Визначити в квазікласичному наближенні середнє значення кінетичної енергії частинки, що рухається в одновимірній потенційній ямі $a \leq x \leq b$.

Розділ 2. Релятивістська квантова механіка

§ 1. Хвильове рівняння Кляйна-Гордона-Фока

Рівняння Шредінгера, як зазначалось вище, можна застосовувати для опису руху частинок, швидкість яких v значно менша за швидкість світла у вакуумі c . Нерелятивістське хвильове рівняння Шредінгера неінваріантне відносно перетворень Лоренца, оскільки просторові координати і часова змінна (часова координата) входять нерівноправно, бо рівняння містить першу похідну за часом та другу похідну за координатами. Згідно з ідеями спеціальної теорії відносності у основному рівнянні теорії повинні входити однакові за структурою доданки відносно просторових та часових координат.

Щоб отримати релятивістське хвильове рівняння, врахуємо релятивістське рівняння для енергії та маси. Розглянемо спочатку випадок вільної частинки. Тоді маємо, що

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4}, \quad (1.1)$$

де $\vec{p}$ – імпульс, m_0 – маса спокою частинки. Далі необхідно використати такий же підхід, як і для запису нерелятивістського хвильового рівняння Шредінгера. Тобто, замість енергії та імпульсу ввести оператори

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (1.2)$$

Для нерелятивістської механіки у випадку вільної частинки

$$E = \frac{p^2}{2m_0}.$$

Згідно з «рецептом» (1.2) хвильове рівняння Шредінгера має вигляд

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_0} \Psi. \quad (1.3)$$

При переході від рівняння релятивістської механіки до релятивістського хвильового рівняння необхідно позбутись квадратного кореня. Цього можна досягнути двома шляхами: замість рівняння (1.1) можна використати рівняння

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4, \quad (1.4)$$

або за допомогою матриць знайти квадратний корінь, який є у правій частині рівняння (1.1).

У цьому параграфі розглянемо перший підхід. За основу виберемо рівняння (1.4). Здійснюючи перехід від фізичних величин до операторів (1.2), отримаємо

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\vec{r}, t) = (-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4) \Psi(\vec{r}, t)$$

або

$$\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 \hbar^2 \nabla^2 - m_0^2 c^4 \right) \Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.5)$$

– **рівняння Кляйна–Гордона–Фока для вільної частинки.**

При наявності електромагнітного поля замість (1.2) необхідно підставити узагальнені оператори

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A}.$$

Тоді отримаємо релятивістське хвильове рівняння за наявності поля

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi \right)^2 - c^2 \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - m_0^2 c^4 \right] \Psi(\vec{r}, t) = 0. \quad (1.6)$$

Рівняння (1.6) відрізняється від рівняння Шредінгера тим, що воно є інваріантним (не змінює свого вигляду) при перетвореннях Лоренца тобто при переході від однієї інерціальної системи відліку до іншої.

§ 2. Рівняння неперервності

Перш, ніж перейти до аналізу рівняння Кляйна-Гордона-Фока (КГФ) для вільної частинки ($\varphi = \vec{A} = 0$), пригадаємо рівняння неперервності в теорії Шредінгера

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_0 = 0, \quad (2.1)$$

де $\rho_0 = \Psi^* \Psi$ – густина ймовірності, $\vec{j}_0 = \frac{\hbar}{2m_0 i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$ – потік ймовірності частинки.

Якщо розглянути випадок зарядженої частинки і помножити величини ρ_0 та $\vec{j}_0$ на величину заряду e , то будемо мати густину заряду $\rho = e\Psi^* \Psi$ та

густину струму $\vec{j} = e\vec{j}_0$, що створені цим зарядом. Тоді отримаємо рівняння неперервності заряду

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0. \quad (2.2)$$

Бачимо, що рівняння (2.1) та (2.2) мають аналогічний вигляд.

Запишемо рівняння КГФ для хвильових функцій Ψ та Ψ^*

$$\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 \hbar^2 \nabla^2 - m_0^2 c^4 \right) \Psi = 0, \quad (2.3)$$

$$\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 \hbar^2 \nabla^2 - m_0^2 c^4 \right) \Psi^* = 0. \quad (2.4)$$

Помножимо рівняння (2.3) зліва на Ψ^* , а (2.4) – на Ψ і відніmemo від першого отриманого рівняння друге:

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* - \frac{1}{c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi - \Psi \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^* \right) = 0. \quad (2.5)$$

Співвідношення (2.5) легко зводиться до рівняння неперервності (2.2), якщо ввести густину заряду та густину струму у вигляді:

$$\rho = \frac{ie\hbar}{2m_0 c} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right), \quad (2.6)$$

$$\vec{j} = \frac{e\hbar}{2im_0} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.7)$$

Густина струму (2.7) збігається з нерелятивістською формулою, а густина заряду (2.6) переходить у відповідний вираз

$$\rho = e\Psi^* \Psi \quad (2.8)$$

теорії Шредінгера при $v \ll c$. Дійсно, скористаємось в (2.6) заміною $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$.

Тоді

$$\rho = \frac{eE}{m_0 c^2} \Psi^* \Psi. \quad (2.9)$$

У нерелятивістському наближенні $E \approx m_0 c^2$, тому з (2.9) отримуємо формулу (2.8). З формули (2.9) можна отримати ще один висновок. Як буде видно пізніше, у релятивістській теорії навіть для вільної частинки існує розв'язок

хвильового рівняння з від'ємними значеннями енергії E . Тоді для густини заряду ρ ми отримуємо знак, що протилежний до e . Отже, релятивістське рівняння в принципі може описувати не лише частинки з від'ємним зарядом ($E > 0$), але й позитивним зарядом ($E < 0$).

З точки зору теорії Шредінгера представлена теорія має суттєвий недолік, бо

$$\rho_0 = \frac{\rho}{e} = \frac{i\hbar}{2m_0c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right)$$

втрачає зміст густини ймовірності частинки. Цей вираз не є позитивно визначеною величиною на відміну від відповідного виразу нерелятивістської теорії

$$\rho_0 = \Psi^* \Psi.$$

Детальніший аналіз рівняння КГФ показує, що воно описує квантові системи з нульовим спіновим моментом. Якщо ж спін частинок не дорівнює нулю, то рівняння КГФ дає можливість врахувати релятивістські ефекти лише наближено.

§ 3. Релятивістська теорія водневоподібного атома без врахування спіна електрона

Запропоновану задачу можна розв'язати за допомогою рівняння (1.6) за умови, що

$$\vec{A} = 0, \quad \varphi = -Ze^2/r. \quad (3.1)$$

Оскільки потенціальна енергія в (3.1) не залежить від часу, можна перейти від рівняння (1.6) до стаціонарного рівняння. Виділимо із загальної енергії частинки, яку вважаємо додатною, власну енергію (енергію спокою) m_0c^2 . Отже, енергія електрона дорівнює:

$$E + m_0c^2 > 0,$$

Тому запишемо хвильову функцію частинки у вигляді:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(E + m_0c^2)t}. \quad (3.2)$$

Підставимо $\Psi(\vec{r}, t)$ у рівняння КГФ (1.6) і врахуємо (3.1)

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 + c^2 \hbar^2 \nabla^2 - m_0^2 c^4 \right] \Phi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}(E+m_0c^2)t} = 0.$$

Тоді для функції $\Phi(\vec{r})$ маємо:

$$\nabla^2 \Phi(\vec{r}) + \frac{1}{c^2 \hbar^2} \left[\left(E + m_0 c^2 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 - m_0^2 c^4 \right] \Phi(\vec{r}) = 0. \quad (3.3)$$

Аналогічно, як і в теорії Шредінгера, перейдемо до сферичної системи координат і розв'язок останнього рівняння шукаємо у вигляді:

$$\Phi(\vec{r}) = R(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (3.4)$$

Врахуємо, що

$$\begin{aligned} \nabla^2 \Phi(\vec{r}) &= \left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 \right) R(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \nabla_r^2 R(r) + \\ &+ R(r) \frac{1}{r^2} \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \nabla_r^2 R(r) - R(r) \frac{l(l+1)}{r^2} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \end{aligned} \quad (3.5)$$

бо

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = -\hbar^2 \nabla_{\vartheta, \varphi}^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = L^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi).$$

Підставимо (3.4) і (3.5) у рівняння (3.3). Отримане рівняння помножимо на $\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \right)$. Для радіальної частини хвильової функції маємо рівняння:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_r^2 + \frac{L^2 - \alpha^2 \hbar^2 Z^2}{2m_0 r^2} - \frac{Ze^2}{r} \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right) - \frac{m_0 c^2}{2} \left[1 - \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2} \right)^2 \right] \right] R(r) = 0, \quad (3.6)$$

де $\alpha = \frac{e^2}{c\hbar} \approx \frac{1}{137}$ – безрозмірна величина, що отримала назву **сталі тонкої структури**. При $c \rightarrow \infty$ рівняння (3.6) перетворюється у відповідне рівняння нерелятивістської квантової механіки (див. (3.8.20)). Поява у (3.6) доданку, що пропорційний $\frac{\alpha^2}{r^2}$, можна вважати введенням додаткової релятивістської енергії притягання.

Далі проведемо такі ж перетворення рівняння (3.6), які у випадку теорії Шредінгера для воднеподібного атома. Введемо допоміжну функцію $\chi(r)$:

$$R(r) = \frac{\chi(r)}{r}$$

і перейдемо до безрозмірної змінної $\rho = \frac{r}{a_B}$, $a_B = \frac{\hbar^2}{m_0 c^2}$. Отримаємо рівняння

$$\frac{d^2 \chi(\rho)}{d\rho^2} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{\rho^2} \chi(\rho) + \frac{2Z}{\rho} \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right) \chi(\rho) + \frac{1}{\alpha^2} \left[1 - \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)^2\right] \chi(\rho) = 0. \quad (3.7)$$

Для малих значень ρ ($\rho \rightarrow 0$) рівняння спроститься:

$$\frac{d^2 \chi_0(\rho)}{d\rho^2} - \frac{l(l+1) - \alpha^2 Z^2}{\rho^2} \chi_0(\rho) = 0.$$

Розв'язок цього рівняння шукаємо у вигляді степеневої функції

$$\chi_0(\rho) \propto \rho^\beta.$$

Тоді для β маємо рівняння

$$\beta(\beta-1) - l(l+1) + \alpha^2 Z^2 = 0$$

з двома розв'язками

$$\beta_1 = \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2}, \quad \beta_2 = \frac{1}{2} - \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2}.$$

Якщо виконується умова

$$Z < \frac{1}{2\alpha},$$

то обидва корені β_1 , β_2 при будь-яких $l=0,1,2,\dots$ будуть дійсними величинами. Простий фізичний зміст має розв'язок з β_1 . При $c \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow 0$, тому $\beta_1 = l+1$. Нас цікавлять зв'язані стани електрона в атомі ($E < 0$). Отже, на нескінченності $\rho \rightarrow \infty$ необхідно, щоб хвильова функція $\chi(\rho)$ прямувала до нуля. З умови обмеженості хвильової функції в усій області визначення отримуємо енергетичний спектр частинки.

Аналогічно до формули (3.9.22) для атома водню в теорії Шредінгера отримуємо рівняння:

$$n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2} - \frac{Z \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)}{\sqrt{\frac{1}{\alpha^2} \left(1 - \left(1 + \frac{E}{m_0 c^2}\right)^2\right)}} = 0,$$

де $n_r = 0, 1, 2, \dots$. Отримане рівняння можна звести до простішого вигляду:

$$E = m_0 c^2 \left[\left(1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - Z^2 \alpha^2} \right)^2} \right)^{-\frac{1}{2}} - 1 \right]. \quad (3.8)$$

Щоб порівняти отриману формулу з більш відомою для енергії воднево-подібного атома нерелятивістської квантової механіки, врахуємо те, що $Z^2 \alpha^2 \ll 1$ і розкладемо функцію (3.8) в ряд. Врахуємо два перші відмінні від нуля доданки ряду. Після проведених спрощень отримуємо, що енергія релятивістського електрона в атомі водню залежить не лише від головного, але й від орбітального квантового числа:

$$E_{nl} = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right). \quad (3.9)$$

Перший доданок збігається з відповідним виразом нерелятивістської теорії, а другий доданок пропорційний квадрату сталої тонкої структури і є релятивістської поправкою, яка визначається квантовими числами n і l .

Отже, врахування релятивістських поправок для атома водню ($Z=1$) знімає виродження за орбітальним квантовим числом, тому енергетичні рівні для заданого значення головного квантового числа розщепляються на n ($l=0, 1, 2, \dots, n-1$) близьких підрівнів.

Для порівняння отриманих результатів з експериментом можна обчислити дублетне розщеплення для серії Бальмера ($n=2$). У цьому випадку величина розщеплення за частотою дорівнює

$$\Delta \omega = \frac{E_{21} - E_{20}}{\hbar} = \frac{1}{12} \frac{m_0 Z^2 e^4}{\hbar^2 n^2} \alpha^2. \quad (3.10)$$

Порівняння числових результатів теорії та експерименту показує, що справжня величина розщеплення для серії Бальмера є в три рази меншою, ніж отримується з формули (3.10). Причина отриманої різниці між теорією та

експериментом полягає в тому, що тонка структура рівнів атома водню визначається не лише релятивістськими властивостями електрона, але й спіном частинки, який нами не враховувався. Отже, виявилось, що рівняння КГФ не може адекватно описувати властивості такої частинки, як електрон. Як зазначалось вище, це рівняння з успіхом можна використати для визначення енергетичного спектру частинки з нульовим спіном. Наприклад, для негативного пі-мезона (піона), який рухається навколо ядра (пі-мезоатом).

§ 4. Рівняння Дірака

У попередньому параграфі зазначалось, що при записі основного рівняння квантової релятивістської механіки використовують релятивістську залежність енергії від імпульсу. При одержанні рівняння Кляйна-Гордона-Фока враховано, що енергія вільної релятивістської частинки представляється формулою:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4.$$

Виявилось, однак, що рівняння КГФ не можна використовувати до опису властивостей електрона, як частинки, що має спін $s = \frac{1}{2}$.

У 1928 р. П.Дірак записав нове рівняння релятивістської квантової механіки, яке виявилось «правильним» для релятивістського електрона. Причому власний момент імпульсу електрона (спін) вводиться цією теорією природним чином. За основу релятивістського співвідношення Дірак вибрав формулу

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \quad (4.1)$$

Для лінеаризації релятивістського співвідношення між енергією та імпульсом можна представити енергію частинки у вигляді лінійної комбінації проекцій імпульсу

$$p_0 = m_0 c, \quad p_1 = p_x, \quad p_2 = p_y, \quad p_3 = p_z,$$

за допомогою деяких матриць α_i ($i = 0, 1, 2, 3$):

$$E = c \sum_{i=0}^3 \alpha_i p_i. \quad (4.2)$$

Властивості матриць α_i знаходимо з умови

$$\begin{aligned} E^2 &= c^2 \sum_{i,j} p_i p_j \alpha_i \alpha_j = \frac{c^2}{2} \sum_{i,j} p_i p_j (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) = \\ &= c^2 (p^2 + m_0^2 c^2) = \frac{c^2}{2} \sum_{i=0}^3 p_i p_i, \quad i, j = 0, 1, 2, 3. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Видно, що повинна виконуватись умова

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{i,j}, \quad (4.4)$$

яку можна конкретизувати двома рівняннями

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0, \quad i \neq j, \quad (4.5)$$

$$\alpha_i^2 = 1. \quad (2.6)$$

Нагадаємо, що такі ж властивості були у матриць Паулі. Про властивість (4.5) інколи кажуть, що різні матриці антикомутують між собою.

Для отримання квадратного кореня від суми додатних величин в (4.1) необхідно ввести чотири матриці $(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$. Дірак запропонував вибрати чотири найпростіші чотирирядні матриці, що характеризуються властивостями (4.4) і (4.5):

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad k = x, y, z, \quad (4.7)$$

де $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ – одинична матриця, а σ_k – матриці Паулі. Гамільтоніан вільної

релятивістської частинки можна записати, використовуючи рівняння (4.2), виходячи з умови, що імпульсу ставиться у відповідність оператор. Отримаємо гамільтоніан Дірака:

$$E = c \sum_{i=0}^3 \alpha_i p_i \rightarrow \hat{H}_D = c \sum_{i=0}^3 \alpha_i \hat{p}_i = c \sum_k \alpha_k \hat{p}_k + m_0 c^2 \alpha_0. \quad (4.8)$$

Суму $\sum_k \alpha_k \hat{p}_k$ можна записати як скалярний добуток $\vec{\alpha} \hat{\vec{p}}$, де $\vec{\alpha}(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$. Тоді

$$\hat{H}_D = c \vec{\alpha} \hat{\vec{p}} + m_0 c^2 \alpha_0. \quad (4.9)$$

Релятивістське квантове рівняння руху буде мати звичну форму, яка використовується в теорії Шредінгера,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}_D \Psi. \quad (4.10)$$

Гамільтоніан (4.9) легко узагальнити на випадок наявності електромагнітного поля. Рецепт переходу нам вже відомий (див (1.6)), тому запишемо гамільтоніан Дірака для зарядженої частинки в полі з скалярним потенціалом φ та векторним потенціалом $\vec{A}$

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + e\varphi \mathbf{I} + m_0 c^2 \alpha_0, \quad (4.11)$$

де $\mathbf{I}$ – одинична матриця 4×4 . Рівняння Дірака також буде мати вигляд (4.10).

Для стаціонарних станів, коли $\frac{\partial \hat{H}_D}{\partial t} = 0$ і стани визначаються заданою

енергією E , хвильова функція $\Psi(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(q)$. Тому рівняння (4.10) переходить в стаціонарне рівняння Дірака

$$\hat{H}_D \psi(q) = E \psi(q). \quad (4.12)$$

У відповідності до числа рядків та стовпців матриць $\vec{\alpha}$, α_0 , $\mathbf{I}$ хвильова функція ψ повинна мати чотири компоненти, які можна об'єднати у вигляді матриці, що складається з одного стовпця:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Спряженою функцією буде ермітово-спряжена матриця, що є однорядковою матрицею

$$\Psi^+ = (\Psi_1^* \quad \Psi_2^* \quad \Psi_3^* \quad \Psi_4^*).$$

Тоді умову нормування на одиницю можна записати у вигляді:

$$\int \Psi^+ \Psi d\tau = \int (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2) d\tau = 1. \quad (4.14)$$

Отже, густина ймовірності для частинки

$$\rho_0 = \Psi^+ \Psi = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + |\Psi_3|^2 + |\Psi_4|^2, \quad (4.15)$$

а густина заряду, що створена частинкою, дорівнює

$$\rho = e \Psi^+ \Psi. \quad (4.16)$$

Як і в теорії Шредінгера, густина ймовірності є додатною функцією координат, а значення $\Psi = \Psi(q, t)$ визначається початковими та крайовими умовами.

§ 5. Рівняння неперервності в теорії Дірака

Для отримання рівняння неперервності запишемо рівняння Дірака частинки

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = c\vec{\alpha}(\hat{\vec{p}}\Psi) - e\vec{\alpha}\vec{A}\Psi + e\phi\mathbf{I}\Psi + m_0c^2\alpha_0\Psi, \quad (5.1)$$

а також ермітово-спряжене рівняння

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} = c(\hat{\vec{p}}\Psi^+)\vec{\alpha}^+ - e\vec{A}\Psi^+\vec{\alpha}^+ + e\phi\Psi^+\mathbf{I} + m_0c^2\Psi^+\alpha_0^+. \quad (5.2)$$

У формулі (5.2) використано умову $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$. Домножимо перше рівняння зліва на Ψ^+ , а друге – справа на Ψ і віднімемо від першого утвореного рівняння друге:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = \Psi^+\hat{H}_D\Psi - \Psi^+\hat{H}_D\Psi. \quad (5.3)$$

Розглянемо детальніше праву частину рівняння (5.3), беручи до уваги, що $\vec{p}^* = -\vec{p}$, а матриці Дірака є ермітовими: $\vec{\alpha}^+ = \vec{\alpha}$, $\alpha_0^+ = \alpha_0$. Тому

$$\begin{aligned} \Psi^+\hat{H}_D\Psi - \Psi^+\hat{H}_D\Psi &= c\Psi^+\vec{\alpha}(\hat{\vec{p}}\Psi) + c(\hat{\vec{p}}\Psi^+)\alpha\Psi - e\Psi^+\vec{\alpha}\vec{A}\Psi + e\vec{A}\Psi^+\vec{\alpha}\Psi + \\ &+ m_0c^2(\Psi^+\alpha_0\Psi - \Psi^+\alpha_0\Psi) = -i\hbar c[\Psi^+\vec{\alpha}(\nabla\Psi) + (\nabla\Psi^+)\vec{\alpha}\Psi] = -i\hbar c\nabla(\Psi^+\vec{\alpha}\Psi) = \\ &= -i\hbar c \operatorname{div}(\Psi^+\vec{\alpha}\Psi). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Підставимо (5.4) у рівняння (5.3). Маємо звичайне рівняння неперервності

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) + c \operatorname{div}(\Psi^+\vec{\alpha}\Psi) &= 0, \\ \frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}_0 &= 0, \end{aligned} \quad (5.5)$$

де потік ймовірності частинки

$$\vec{j}_0 = c\Psi^+\vec{\alpha}\Psi. \quad (5.6)$$

Для величини заряду рівняння неперервності запишеться традиційно:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (5.7)$$

де $\rho = e\Psi^+\Psi$ – густина заряду, $\vec{j} = ec\Psi^+\vec{\alpha}\Psi$ – густина струму, що створений частинкою.

§ 6. Момент імпульсу частинки

Нехай релятивістська частинка, що описується гамільтоніаном Дірака поміщена в центральносиметричне поле

$$V(r) = e\varphi(r). \quad (6.1)$$

Тоді гамільтоніан релятивістської частинки

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha}\hat{p} + \alpha_0 m_0 c^2 + V(r). \quad (6.2)$$

Доведемо, що на відміну від теорії Шредінгера гамільтоніан (6.2) не комутує з z – проекцією оператора моменту імпульсу частинки

$$\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p}, \quad \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (6.3)$$

Запишемо комутатор операторів $\hat{L}_z$ і $\hat{H}_D$:

$$[\hat{L}_z, \hat{H}_D] = [L_z, c\vec{\alpha}\hat{p}] + [L_z, \alpha_0 m_0 c^2] + [L_z, V(r)]. \quad (6.4)$$

Другий доданок дорівнює нулю, бо $\alpha_0 m_0 c^2$ не залежить від координатних змінних. Оператори $\hat{L}_z(\varphi)$ та $V(r)$ комутують між собою, бо залежать від різних незалежних змінних. Отже,

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{H}_D] &= [L_z, c\alpha_x \hat{p}_x + c\alpha_y \hat{p}_y + c\alpha_z \hat{p}_z] = c\alpha_x [L_z, \hat{p}_x] + c\alpha_y [L_z, \hat{p}_y] = \\ &= c\alpha_x [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, \hat{p}_x] + c\alpha_y [x\hat{p}_y - y\hat{p}_x, \hat{p}_y] = c\alpha_x [x\hat{p}_y, \hat{p}_x] - c\alpha_y [y\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \\ &= c\alpha_x \hat{p}_y [x, \hat{p}_x] - c\alpha_y \hat{p}_x [y, \hat{p}_y] = i\hbar c (\alpha_x \hat{p}_y - \alpha_y \hat{p}_x), \\ [\hat{L}_z, \hat{H}_D] &= i\hbar c (\alpha_x \hat{p}_y - \alpha_y \hat{p}_x) \neq 0. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Знайдемо тепер комутатор $\left[\frac{\hbar}{2} \sigma_z, \hat{H}_D \right]$. При знаходженні цього комутатора матрицю Паулі потрібно помножити на чотирирядну одиничну матрицю $\mathbf{I}$, щоб всі оператори були матрицями однакової розмірності. Отже,

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar}{2} \sigma_z \mathbf{I}, \hat{H}_D \right] &= \frac{\hbar}{2} \left[\sigma_z \mathbf{I}, c(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z) + m_0 c^2 \alpha_0 \right] = \\ &= \frac{\hbar}{2} c \left\{ [\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_x] \hat{p}_x + [\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_y] \hat{p}_y + [\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_z] \hat{p}_z + m_0 c [\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_0] \right\}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Визначимо перший комутатор:

$$\begin{aligned} [\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_x] &= \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \sigma_z \\ \sigma_x \sigma_z & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i\sigma_y \\ 2i\sigma_y & 0 \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix} = 2i\alpha_y. \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$[\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_y] = \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_z, \sigma_x] \\ [\sigma_z, \sigma_x] & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -2i\sigma_x \\ -2i\sigma_x & 0 \end{pmatrix} = -2i\alpha_x. \quad (6.8)$$

Очевидно, що

$$[\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_z] = \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_z, \sigma_z] \\ [\sigma_z, \sigma_z] & 0 \end{pmatrix} = 0. \quad (6.9)$$

Знайдемо останній комутатор рівняння (6.6):

$$[\sigma_z \mathbf{I}, \alpha_0] = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix} = 0. \quad (6.10)$$

Підставимо величини комутаторів з (6.7)-(6.10) у рівняння (6.6).

Отримаємо простий вираз для шуканого комутатора

$$\left[\frac{\hbar}{2} \sigma_z, \hat{H}_D \right] = \frac{\hbar c}{2} (2i\alpha_y \hat{p}_x - 2i\alpha_x \hat{p}_y) = i\hbar c (\alpha_y \hat{p}_x - \alpha_x \hat{p}_y). \quad (6.11)$$

З рівнянь (6.5) та (6.11) неважко зробити висновок, що

$$\left[\hat{L}_z + \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \hat{H}_D \right] = 0. \quad (6.12)$$

Отже, в центральносиметричному полі релятивістська частинка теорії Дірака характеризується тим, що закон збереження справедливий не для z -проекції орбітального моменту імпульсу L_z , для z -проекції повного моменту імпульсу, що є сумою орбітального та власного (спінового) моменту:

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}, \quad (6.13)$$

де оператор спінового моменту

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z. \quad (6.14)$$

Бачимо, що оператор власного моменту має такий вигляд, як для частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$. Нагадаємо, що власні значення операторів S_z та S^2 визначаються з формул:

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1), \quad s = \frac{1}{2}$$

$$S_z = \hbar m_s, \quad m_s = \pm \frac{1}{2}. \quad (6.15)$$

Варто ще раз зазначити, що власний момент імпульсу частинки виник природно в теорії Дірака. Через те, що рівняння Дірака, як ми довели, описує властивості частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$, то часто кажуть, що це рівняння описує релятивістський електрон.

§ 7. Додавання моментів

Знайдемо хвильову функцію, що є власною функцією повного моменту імпульсу. Повний момент дорівнює сумі орбітального та спінового моментів. Для простоти обмежимося наближенням Паулі, коли спін описується дворядними матрицями $\vec{\sigma}$.

У цьому випадку розв'язок потрібно шукати у вигляді двокомпонентної матриці

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (7.1)$$

Між елементами цієї матриці необхідно встановити зв'язок, що враховує закон збереження повного моменту кількості руху. Зокрема,

$$\hat{J}^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left(\hat{L} + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma} \right)^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (7.2)$$

$$\hat{J}_z \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left(\hat{L}_z + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_z \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar m_j \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Розв'язок системи рівнянь (7.2) запишемо у вигляді:

$$\Psi_1 = C_1 Y_{lm'}, \quad \Psi_2 = C_2 Y_{lm}, \quad (7.4)$$

де Y_{lm} – сферичні функції. Тоді неважко переконатись, що виконується рівняння

$$\hat{L}^2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 l(l+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

З рівняння (7.2) маємо

$$\left(\hat{L}^2 + \hbar \left(\hat{\sigma} \hat{L} \right) + \frac{1}{4} \hbar^2 \hat{\sigma}^2 \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$$

або

$$\frac{1}{\hbar} \left(\hat{\sigma} \hat{L} \right) \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}. \quad (7.6)$$

Виконавши скалярне множення $\left(\hat{\sigma} \hat{L} \right)$ та перемноживши відповідні матриці у лівій частині рівняння, одержимо систему двох рівнянь для функцій Ψ_1 та Ψ_2 :

$$\hat{L}_- \Psi_2 + \hat{L}_z \Psi_1 = \hbar \gamma \Psi_1, \quad \hat{L}_+ \Psi_1 - \hat{L}_z \Psi_2 = \hbar \gamma \Psi_2, \quad (7.7)$$

де $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$.

Як зазначалось вище, оператори $\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$ переводять частинку зі стану $Y_{l,m}$ у стани $Y_{l,m+1}$ та $Y_{l,m-1}$ відповідно, а саме:

$$\hat{L}_\pm Y_{lm} = -\hbar \sqrt{(l+1 \pm m)(l \mp m)} Y_{l,m \pm 1}. \quad (7.8)$$

Підставимо (7.4) у рівняння (7.7) і використаємо (7.8). Отримаємо

$$\begin{aligned} \hbar m' C_1 Y_{lm'} - \hbar \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_2 Y_{l,m-1} &= \hbar \gamma C_1 Y_{lm'}, \\ -\hbar \sqrt{(l+1+m')(l-m')} C_1 Y_{l,m'+1} - \hbar m C_2 Y_{l,m} &= \hbar \gamma C_2 Y_{l,m}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Якщо у рівняннях (7.9) розглянути випадок, коли $m' = m-1$, то сферичні функції скоротяться і ми отримаємо систему однорідних рівнянь відносно C_1 і C_2 :

$$\begin{aligned} (m-1-\gamma) C_1 - \sqrt{(l+1-m)(l+m)} C_2 &= 0, \\ \sqrt{(l+m)(l+1-m)} C_1 + (m+\gamma) C_2 &= 0. \end{aligned} \quad (7.10)$$

Система має нетривіальні розв'язки, якщо її визначник дорівнює нулю. Отримуємо квадратне рівняння відносно γ . Розв'язками рівняння є

$$\gamma_1 = l, \gamma_2 = -(l+1).$$

У першому випадку ($\gamma_1 = l$)

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = l, C_2 = -\sqrt{\frac{l-m+1}{l+m}} C_1,$$

тому додатне значення $j = l + \frac{1}{2}$ відповідає паралельності спінового і орбітального моментів (від'ємне і не має фізичного змісту). Для $\gamma_2 = -(l+1)$ маємо, що

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = -(l+1), C_2 = \sqrt{\frac{l+m}{l-m+1}} C_1,$$

а, отже, $j = l - \frac{1}{2}$ (спінові та орбітальні моменти антипаралельні).

Величини C_1 і C_2 , що визначають внески сферичних функцій у власну функцію оператора суми двох моментів називають **коефіцієнтами Клебша-Гордона**. З умови нормування

$$\int \Psi^+ \Psi d\Omega = 1$$

або

$$C_1^2 + C_2^2 = 1$$

можна визначити двокомпонентні матриці (7.1) для $j = l \pm \frac{1}{2}$ ($l = 0, 1, 2, \dots$).

Отримуємо

$$\Psi_{\left(j=l+\frac{1}{2}\right)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix} \equiv Y_{l,m}^{\left(j=l+\frac{1}{2}\right)}, \quad (7.11)$$

$$\Psi_{\left(j=l-\frac{1}{2}\right)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix} \equiv Y_{l,m}^{\left(j=l-\frac{1}{2}\right)}. \quad (7.12)$$

Матриці $Y_{l,m}^{(j)}$ називають **сферичними спінорами**. Умова ортонормованості для сферичних спінорів має вигляд:

$$\int \left(Y_{l',m'}^{(j')} \right)^+ Y_{l,m}^{(j)} d\Omega = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (7.13)$$

Сферичні спінори є узагальненнями звичайних сферичних функцій, а також є кутовою частиною розв'язку будь-яких задач, що пов'язані з рухом частинки з напівцілим спіном в полі центральних сил.

§ 8. Рівняння Дірака в нерелятивістському і слабо релятивістському наближеннях

Наше завдання полягає в тому, щоб проаналізувати рівняння Дірака, розглянувши різні наближення. Вплив магнітного поля на рух електрона, що характеризується спіном, проявляється вже при врахуванні доданків порядку $\frac{v}{c}$ (нерелятивістське наближення Паулі). Для електрона в електричному полі спінові ефекти проявляються в доданках другого порядку малості, тобто пропорційні $\frac{v^2}{c^2}$ (квазірелятивістське наближення). Тому при відносно невеликих швидкостях частинки рівняння Дірака можна записати в наближеній формі, коли не враховуються величини вищого порядку малості, ніж $\frac{v^2}{c^2}$. За такого наближення особливо чітко видно роль як релятивістських, так і спінових доданків.

Розглянемо випадок, коли електричне і магнітне поле не залежить від часу. Тому ми можемо перейти до стаціонарного рівняння:

$$\left(c\vec{\alpha} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + e\varphi \mathbf{I} + m_0 c^2 \alpha_0 \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (8.1)$$

Введемо позначення

$$\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \equiv \hat{\vec{P}}, \quad e\varphi = V, \quad E = \varepsilon + m_0 c^2.$$

Розглянемо випадок додатніх значень енергій частинки $E > 0$. Нижче побачимо, що рівняння Дірака описує також стани із від'ємними енергіями. Тоді (8.1) можна записати у вигляді:

$$\left(c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \hat{P} + V \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (\varepsilon + m_0 c^2) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (8.2)$$

Після перемноження матриць зліва у рівнянні (8.2) отримуємо суму одностовпцевих матриць. Тому рівняння (8.2) зводиться до рівності двоелементних одностовпцевих матриць. Отримуємо такі рівняння:

$$c \left(\vec{\sigma} \hat{P} \right) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = (\varepsilon - V) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (8.3)$$

$$c \left(\vec{\sigma} \hat{P} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (\varepsilon - V + 2m_0 c^2) \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (8.4)$$

З (8.4) можна визначити матрицю з елементами ψ_3 та ψ_4

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(1 + \frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} \right)^{-1} \left(\vec{\sigma} \hat{P} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (8.5)$$

Здійснимо перехід від рівнянь Дірака (8.3), (8.4) до рівняння Паулі, в якому враховуються доданки порядку $\frac{v}{c}$. З точки зору класичної механіки

$\varepsilon - V = \frac{mv^2}{2}$. Тому у правій частині (8.5) знехтуємо біля одиниці доданком, що

пропорційний $\frac{v^2}{c^2}$. Рівняння (8.5) спроститься до такого

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c^2} \left(\vec{\sigma} \hat{P} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (8.6)$$

Видно, що для розглядуваного випадку $E > 0$ компоненти $\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ є малими, бо

мають порядок $\frac{v}{c}$ відносно $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$, оскільки $\frac{P}{m_0 c} \ll \frac{v}{c}$. Зрозуміло, що для

від'ємних енергій ($E < 0$) малою буде хвильова функція $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$.

Підставимо $\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ з (8.6) у рівняння (8.3). Маємо рівняння для великих компонент хвильової функції

$$\frac{1}{2m_0}(\vec{\sigma}\hat{P})(\vec{\sigma}\hat{P})\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (\varepsilon - V)\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (8.7)$$

Для спрощення лівої частини рівняння (8.7) розглянемо добуток $(\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b})$ при будь-яких значеннях векторів $\vec{a}$ і $\vec{b}$. Виразимо цей добуток через скалярний і векторний добутки цих векторів, використовуючи властивості матриць Паулі

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b}) &= (\sigma_x a_x + \sigma_y a_y + \sigma_z a_z)(\sigma_x b_x + \sigma_y b_y + \sigma_z b_z) = \sigma_x^2 a_x b_x + \sigma_y^2 a_y b_y + \sigma_z^2 a_z b_z + \\ &+ \sigma_x \sigma_y a_x b_y + \sigma_x \sigma_z a_x b_z + \sigma_y \sigma_x a_y b_x + \sigma_y \sigma_z a_y b_z + \sigma_z \sigma_x a_z b_x + \sigma_z \sigma_y a_z b_y = \\ &= \vec{a}\vec{b} + i\sigma_z(a_x b_y - a_y b_x) + i\sigma_x(a_y b_z - a_z b_y) + i\sigma_y(a_z b_x - a_x b_z) = \vec{a}\vec{b} + i\vec{\sigma}(\vec{a} \times \vec{b}). \end{aligned} \quad (8.8)$$

Ґрунтуючись на (8.8) знаходимо, що

$$(\vec{\sigma}\hat{P})(\vec{\sigma}\hat{P}) = \hat{P}^2 + i\vec{\sigma}(\hat{P} \times \hat{P}). \quad (8.9)$$

Згадаймо також те, що

$$\hat{P} = \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right),$$

тому

$$\left(\hat{P} \times \hat{P} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \times \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \Psi = \hat{p} \times \hat{p} \Psi + \frac{e^2}{c^2} \vec{A} \times \vec{A} \Psi - \frac{e}{c} \hat{p} \times \vec{A} \Psi - \frac{e}{c} \vec{A} \times \hat{p} \Psi. \quad (8.10)$$

Згідно означення векторного добутку перший та другий доданки дорівнюють нулю. При обчисленні третього доданку необхідно нагадати як діє добуток операторів на функцію, а також те, що $\hat{p} = -i\hbar\nabla$. Розглянемо спочатку, як діє x -ва проекція векторного добутку на хвильову функцію:

$$\begin{aligned} \left(\hat{p} \times \vec{A} \right)_x \Psi &= (\hat{p}_y A_z - \hat{p}_z A_y) \Psi = -i\hbar \left(\Psi \frac{\partial}{\partial y} A_z + A_z \frac{\partial}{\partial y} \Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial z} A_y - A_y \frac{\partial}{\partial z} \Psi \right) = \\ &= -i\hbar (\text{rot } \vec{A})_x \Psi - (\vec{A} \times \hat{p})_x \Psi. \end{aligned}$$

Зважаючи на рівноправність всіх координат векторного добутку, можемо записати загальне рівняння:

$$\hat{\vec{p}} \times \vec{A} \Psi = -\vec{A} \times \vec{p} \Psi - i\hbar \text{rot } \vec{A} \Psi. \quad (8.11)$$

Врахуємо тепер те, що напруженість магнітного поля у вакуумі

$$\vec{B} = \vec{H} = \text{rot } \vec{A}.$$

Згадаймо тепер формулу (8.10). Маємо

$$\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{p}} \right) \Psi = -\frac{e}{c} \left(-\vec{A} \times \hat{\vec{p}} \Psi - i\hbar \vec{H} \Psi \right) - \frac{e}{c} \vec{A} \times \hat{\vec{p}} \Psi = i \frac{\hbar e}{c} \vec{H} \Psi. \quad (8.12)$$

Підставимо (8.12) в рівняння (8.9). Отримаємо

$$\left(\vec{\sigma} \hat{\vec{p}} \right) \left(\vec{\sigma} \hat{\vec{p}} \right) = \hat{P}^2 - \frac{e\hbar}{c} \left(\vec{\sigma} \vec{H} \right). \quad (8.13)$$

Повернемося до рівняння Дірака (8.7), враховуючи умову (8.13),

$$\left[\frac{\hat{P}^2}{2m_0} - \frac{e\hbar}{c} \left(\vec{\sigma} \vec{H} \right) \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (\varepsilon - V) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

або

$$\left[\frac{\hat{P}^2}{2m_0} + V(r) - \frac{e\hbar}{c} \left(\vec{\sigma} \vec{H} \right) \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (8.14)$$

Рівняння (8.14) називається **рівнянням Паулі**. Нагадаємо, що ми його отримали тоді, коли в рівнянні Дірака врахували малі доданки, що пропорційні $\frac{v}{c}$. По суті це рівняння є узагальненням рівняння Шредінгера, на випадок врахування спіна електрона, який знаходиться в магнітному полі. Дійсно, можна вважати, що внаслідок існування власного моменту імпульсу $\frac{\hbar}{2} \hat{\vec{\sigma}}$, електрон має також власний магнітний момент, оператор якого

$$\hat{\vec{\mu}} = \frac{e\hbar}{2m_0c} \hat{\vec{\sigma}}. \quad (8.15)$$

Тоді в магнітному полі у електрона виникає додаткова енергія взаємодії

$$\hat{U} = -\hat{\vec{\mu}} \vec{H}. \quad (8.16)$$

Варто зауважити, що магнітний момент електрона (8.15) постулювався Паулі ще до створення теорії Дірака, виходячи з аналізу експериментальних даних.

Теорія Дірака дає можливість отримати для електрона гіромагнітне відношення – відношення магнітного моменту частинки до моменту імпульсу.

Дійсно, згадаємо, що $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$, тому оператор магнітного моменту електрона (8.15) можна записати так:

$$\hat{\mu} = g \mu_B \hat{S}, \quad g = 2, \quad \hat{\mu}_z = g \mu_B \hat{S}_z,$$

де g – називають **g -фактором електрона**, а $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ – **магнетоном Бора**.

Оператори $\hat{\mu}_z$ і $\hat{S}_z$ мають однакові власні функції, тому для власних значень цих операторів маємо

$$\frac{|\mu_z|}{|S_z|} = g \mu_B.$$

Розглянемо тепер вплив релятивістських та спінових ефектів на рух електрона в електричному полі. Для цього в рівнянні Дірака будемо вважати, що $\vec{A} = 0$ і врахуємо всі доданки, що є не меншими за $\frac{v^2}{c^2}$ порядок мализни.

Врахуємо надалі, що $\hat{P} = \hat{p}$. У цьому наближенні також можна перейти від чотирикомпонентної хвильової функції до двокомпонентної. Для такого переходу необхідно провести так зване «перенормування». Запишемо густину ймовірності частинки через двокомпонентні матриці $\begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}$ згідно з умовою

$$\Psi^+ \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1^* & \tilde{\Psi}_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}. \quad (8.18)$$

Введемо ермітовий оператор $\hat{N}$ таким, щоб виконувалася умова

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hat{N} \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}.$$

Тоді буде виконуватись наступне рівняння:

$$\begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1^* & \tilde{\Psi}_2^* \end{pmatrix} \hat{N}.$$

Розглянемо рівняння (8.5) і врахуємо, що у правій частині рівняння доданок біля одиниці є малим (пропорційним $\frac{v^2}{c^2}$). Використовуючи розклад в

ряд функції $\frac{1}{1+x}$ за умови $x \ll 1$, одержимо

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c} \left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} \right) (\vec{\sigma} \hat{p}) \hat{N} \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix} \equiv M \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}. \quad (8.19)$$

Скористаємось правилами ермітового спряження від добутку операторів. Знайдемо, що

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}^+ = (\psi_3^* \quad \psi_4^*) = \frac{1}{2m_0 c} (\tilde{\Psi}_1^* \quad \tilde{\Psi}_2^*) \hat{N}^+ (\vec{\sigma} \hat{p}) \left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} \right). \quad (8.20)$$

Підставимо останні чотири рівняння в формулу для густини ймовірності (8.18)

$$\begin{aligned} \Psi^+ \Psi &= \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1^* \hat{N} & \tilde{\Psi}_2^* \hat{N} & \tilde{\Psi}_1^* \hat{M} & \tilde{\Psi}_2^* \hat{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{N} \tilde{\Psi}_1 \\ \hat{N} \tilde{\Psi}_2 \\ \hat{M} \tilde{\Psi}_1 \\ \hat{M} \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix} = \tilde{\Psi}_1^* (\hat{N}^2 + \hat{M}^2) \tilde{\Psi}_1 + \tilde{\Psi}_2^* (\hat{N}^2 + \hat{M}^2) \tilde{\Psi}_2 = \\ &= (\tilde{\Psi}_1^* \quad \tilde{\Psi}_2^*) (\hat{N}^2 + \hat{M}^2) \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8.21)$$

де

$$\hat{M} = \frac{1}{2m_0 c} \left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} \right) (\vec{\sigma} \hat{p}) \hat{N}. \quad (8.22)$$

Вираз для $\hat{M}^2$ можна спростити, бо ми враховуємо лише доданки порядку $\frac{v^2}{c^2}$.

Врахуємо, що $\frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} \ll \frac{v^2}{c^2}$, тому цим доданком можна знехтувати, щоб $\hat{M}^2$

містило доданки не вищого порядку малості, ніж $\frac{v^2}{c^2}$

$$\hat{M}^2 = \frac{1}{2m_0 c} (\vec{\sigma} \hat{p}) \hat{N} \frac{1}{2m_0 c} (\vec{\sigma} \hat{p}) \hat{N} = \frac{(\vec{\sigma} \hat{p})(\vec{\sigma} \hat{p})}{4m_0^2 c^2} \hat{N}^2 = \frac{\hat{p}^2}{4m_0^2 c^2} \hat{N}^2. \quad (8.23)$$

Підставимо (8.23) в умову (8.21). Тоді густина ймовірності частинки (8.18) записується у вигляді:

$$\Psi^+ \Psi = \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1^* & \tilde{\Psi}_2^* \end{pmatrix} \hat{N}^2 \left(1 + \frac{\hat{p}^2}{4m_0^2 c^2} \right) \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1^* & \tilde{\Psi}_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}. \quad (8.24)$$

Отже,

$$\hat{N}^2 \left(1 + \frac{\hat{p}^2}{4m_0^2 c^2} \right) = 1. \quad (8.25)$$

Використаємо умову малості $\frac{\hat{p}^2}{4m_0^2 c^2}$. Представимо оператор $\hat{N}$ через ряд і врахуємо перші доданки ряду:

$$\hat{N} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\hat{p}^2}{4m_0^2 c^2}}} = 1 - \frac{\hat{p}^2}{8m_0^2 c^2} + \dots \quad (8.26)$$

Зазначимо, що другий доданок у (8.26) має порядок малості $\frac{v^2}{c^2}$, тому в

наближенні Паулі, в якому враховувались лише доданки порядку $\frac{v}{c}$, цим

доданком можна знехтувати і $\hat{N} = 1$. Тепер можемо представити матриці $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$,

$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ через $\begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left(1 - \frac{\hat{p}^2}{8m_0^2 c^2} \right) \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2m_0 c} \left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} - \frac{\hat{p}^2}{8m_0^2 c^2} \right) (\vec{\sigma} \hat{p}) \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}. \quad (8.27)$$

Підставимо умови (8.27) в рівняння (8.3). Отримаємо

$$(\varepsilon - V) \begin{pmatrix} 1 - \frac{\hat{p}^2}{8m_0^2 c^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix} = \frac{(\vec{\sigma} \hat{p})}{2m_0} \left(1 - \frac{\varepsilon - V}{2m_0 c^2} - \frac{\hat{p}^2}{8m_0^2 c^2} \right) (\vec{\sigma} \hat{p}) \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}. \quad (8.28)$$

Другий та третій доданки у правій частині рівняння (8.28) можна записати в іншій формі, якщо використати те, що оператор імпульсу виражається через оператор $\vec{\nabla}$

$$(\vec{\sigma}\hat{p})(\varepsilon - V)(\vec{\sigma}\hat{p})\Psi = (\varepsilon - V)(\vec{\sigma}\hat{p})(\vec{\sigma}\hat{p})\Psi - (\vec{\sigma}\hat{p}V)(\vec{\sigma}\hat{p})\Psi. \quad (8.29)$$

Врахуємо далі те, що

$$(\vec{\sigma}\hat{p})(\vec{\sigma}\hat{p}) = \hat{p}^2, \quad \vec{\sigma}\hat{p}V = -i\hbar(\vec{\sigma}\nabla V) = i\hbar e(\vec{\sigma}\vec{E}),$$

де $\vec{E}$ – напруженість електричного поля. Другий доданок у (8.29) з врахуванням властивості (8.8), також залежить від напруженості поля $\vec{E}$:

$$(\vec{\sigma}\hat{p}V)(\vec{\sigma}\hat{p})\Psi = i\hbar(\vec{\sigma}\vec{E})(\vec{\sigma}\hat{p})\Psi = \left[i\hbar(\vec{E}\hat{p}) - e\hbar\vec{\sigma}(\vec{E} \times \hat{p}) \right]\Psi.$$

Повертаючись до рівняння (8.29), маємо

$$(\vec{\sigma}\hat{p})(\varepsilon - V)(\vec{\sigma}\hat{p})\Psi = (\varepsilon - V)\hat{p}^2\Psi - i\hbar e(\vec{E}\hat{p})\Psi + e\hbar\vec{\sigma}(\vec{E} \times \hat{p})\Psi. \quad (8.30)$$

Можна довести також, що

$$\frac{\hat{p}^4}{2m_0}\Psi = \hat{p}^2(\varepsilon - V)\Psi = \left[(\varepsilon - V)\hat{p}^2 - i2\hbar e(\vec{E}\hat{p}) + \hbar^2 e\nabla^2\varphi \right]\Psi, \quad (8.31)$$

де $V = e\varphi$, φ – потенціал електричного поля. З рівняння (8.31) видно, що

$$(\varepsilon - V)\hat{p}^2 = \frac{\hat{p}^4}{2m_0} + 2i\hbar e(\vec{E}\hat{p}) - \hbar^2 e\nabla^2\varphi. \quad (8.32)$$

Підставимо (8.30) і (8.32) в рівняння (8.28). Отримаємо рівняння Дірака в слабо релятивістському наближенні, в якому враховано всі доданки, які мають

більший порядок малості, ніж $\frac{v^3}{c^3}$:

$$\left(\varepsilon - e\varphi - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} \right) \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix} = \hat{W} \begin{pmatrix} \tilde{\Psi}_1 \\ \tilde{\Psi}_2 \end{pmatrix}, \quad (8.33)$$

де додатковий до нерелятивістського рівняння Шредінгера оператор дорівнює:

$$\hat{W} = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}(\vec{E} \times \hat{p})) + \frac{\hbar^2 e}{8m_0^2c^2}\nabla^2\varphi. \quad (8.34)$$

Якщо припустити, що оператор $\hat{W}$ в (8.33) дорівнює нулю, то отримане рівняння буде описувати рух частинки в постійному електричному полі для

нерелятивістського наближення. Отже, в правій частині цього рівняння оператор енергії $\hat{W}$ враховує релятивістські та спінові ефекти. Проаналізуємо цей оператор детальніше.

Перший доданок

$$\hat{W}_r = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3c^2}$$

задає поправку, що зумовлена релятивістською швидкістю електрона. Аналогічна додаткова енергія виникає також і в релятивістському рівнянні Кляйна-Гордона-Фока. Класичний аналог цього доданка можна отримати при розкладі релятивістського виразу для енергії (функції гамільтона) в ряд:

$$H = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} \approx m_0c^2 + \frac{p^2}{2m_0} - \frac{p^4}{8m_0^3c^2}.$$

Наступний доданок у (8.34) характеризує так звану спін-орбітальну взаємодію

$$\hat{W}_{so} = -\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2} \left(\vec{\sigma} \left(\vec{E} \times \hat{\vec{p}} \right) \right), \quad (8.35)$$

яка описує взаємодію магнітного моменту електрона, що рухається з електричним полем. Зокрема, для випадку руху електрона в полі ядра

$$V = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (8.36)$$

тоді взаємодія магнітного моменту електрона з ядром згідно з формулою (8.35) задається таким оператором спін-орбітальної взаємодії:

$$\hat{W}_{so} = \frac{Ze^2 \left(\hat{\vec{S}} \hat{\vec{L}} \right)}{2m_0^2c^2r^3}, \quad (8.37)$$

де $\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, $\hat{\vec{L}} = (\vec{r} \times \hat{\vec{p}})$ – оператори спінового та орбітального моментів.

Зазначимо, що спін-орбітальна взаємодія відсутня для s -станів, у яких орбітальний момент перетворюється в нуль.

Останній доданок оператора W для випадку кулонівського поля (8.36)

$$W_c = \frac{\hbar^2 e}{8m_0^2c^2} \nabla^2 \varphi = \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m_0^2c^2} \delta(\vec{r})$$

називається поправкою Дарвіна або контактною взаємодією. Відповідна додаткова енергія

$$\Delta \varepsilon_c = \int \Psi^+ W_c \Psi d^3x$$

пропорційна $|\Psi(0)|^2$ і відмінна від нуля лише для s -станів ($l=0$), оскільки лише в цьому випадку $|\Psi(0)|^2 \neq 0$. Для інших станів ($l \neq 0$) квадрат хвильової функції при $r=0$ дорівнює нулю. Тому контактну енергію можна розглядати як спін-орбітальну взаємодію для s -станів. Бачимо, що останні два доданки оператора (8.34) характеризують спінові властивості електрона.

§ 9. Тонка структура енергетичного спектру водневоподібного атома

Ми розглядали теорію воднево подібного атома в нерелятивістській квантовій механіці Шредінгера. Енергія електрона водневоподібного атома визначається головним квантовим числом

$$E_n = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n=1, 2, \dots \quad (9.1)$$

На основі цієї формули можна пояснити основні характеристики оптичних спектрів атомів. Детальний аналіз цих спектрів показує, що вони характеризуються тонкою структурою, яку не можна описати на основі теорії Шредінгера, яка не враховує релятивістських та спінових ефектів.

Теорію воднево-подібного атома, яка б пояснювала тонку структуру оптичних спектрів, можна побудувати лише з допомогою рівняння Дірака. Рівняння Дірака для воднево-подібного атома розв'язується точно, як і у випадку нерелятивістського рівняння Шредінгера. Отриманий розв'язок є досить складним і важко піддається аналізу. Можна врахувати той факт, що доданки в гамільтоніані, які описують релятивістські та спінові ефекти є малими. Тому зручніше використати підхід що ґрунтується на формулах попередніх параграфів, в яких в гамільтоніані враховано всі доданки з точністю до $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ -порядку.

Хвильова функція електрона з врахуванням спіна має вигляд:

$$\Psi = R_{nl}(r)Y_{lm}^{(j)}(\vartheta, \varphi), \quad (9.2)$$

де $R(r)$ – радіальна частина хвильової функції, $Y_{lm}^{(j)}(\vartheta, \varphi)$ – сферичні спінори,

а $j = l + \frac{1}{2}$, коли спін паралельний орбітальному моменту та $j = l - \frac{1}{2}$ у випадку

антипаралельності спіну і орбітального моменту. Тоді

$$Y_{lm}^{(j=l+\frac{1}{2})} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix},$$

$$Y_{lm}^{(j=l-\frac{1}{2})} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix}. \quad (9.3)$$

Нагадаємо умову ортонормованості сферичних функцій та сферичних спінів:

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'},$$

$$\int Y_{l'm'}^{(j')*} Y_{lm}^{(j)} d\Omega = \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (9.4)$$

Для визначення стаціонарних станів електрона в кулонівському полі

ядра з потенціальною енергією $V(r) = e\varphi = -\frac{Ze^2}{r}$ необхідно розв'язати рівняння (див. 8.33):

$$[\hat{H}_a + \hat{W}_r + \hat{W}_{so} + \hat{W}_c] \Psi = E \Psi, \quad (9.5)$$

де

$$\hat{H}_a = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{Ze^2}{r}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

E – енергія електрона в атомі з врахуванням релятивістських та спінових поправок, $\hat{W}_r, \hat{W}_{so}, \hat{W}_c$ – релятивістські поправки до оператора енергії нерелятивістського руху $\hat{H}_a$:

$$W_r = -\frac{\hat{p}^4}{8m_0^3 c^2} = -\frac{\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)^2}{2m_0 c^2}, \quad (9.7)$$

$$W_{so} = \frac{Ze^2 (\vec{S}\vec{L})}{2m_0^2 c^2 r^3}, \quad (9.8)$$

$$W_c = \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m_0^2 c^2} \delta(\vec{r}). \quad (9.9)$$

Рівняння (9.5) отримано за умови, що

$$\frac{p^2}{2m_0} \approx E + \frac{Ze^2}{r} \approx \frac{Ze^2}{r} \ll 2m_0 c^2,$$

тому його можна використовувати для відстаней

$$r \ll \frac{Ze^2}{2m_0 c^2} \approx 1,4Z \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Обчислення поправок $\hat{W}_{so}, \hat{W}_c$ показують, що роль малих значень r дуже мала, незважаючи на особливості зазначених функцій (9.8), (9.9) при $r = 0$.

Спрощення рівняння (9.5) можна добитись введенням оператора повного моменту електрона

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}. \quad (9.10)$$

Тоді доданки $\hat{H}_0$ та $\hat{W}_{so}$ операторної частини рівняння (9.5) можна подати у вигляді:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2m_0 r^2} - \frac{Ze^2}{r}, \quad (9.11)$$

$$\hat{W}_{so} = \frac{Ze^2}{4m_0^2 c^2 r^3} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2), \quad (9.12)$$

бо згідно (9.10) $2\hat{L}\hat{S} = \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2$.

Враховуючи те, що квадрат операторів орбітального та спінового моменту комутують між собою, неважко зрозуміти, що $\hat{J}^2$ також комутують з $\hat{L}^2$ та $\hat{S}^2$. Отже, електрон в стаціонарних станах може характеризуватись цими трьома фізичними величинами. У цих станах залежність хвильових функцій від кутових та спінових змінних визначається сферичними спінорами (9.3), які є власними функціями операторів $\hat{J}^2, \hat{L}^2, \hat{S}^2$. Через те оператори кутових моментів можна замінити їх власними значеннями (див. рівняння (7.2)-(7.5)).

Таким чином, рівняння для радіальної складової хвильової функції електрона воднево-подібного атома перетвориться до такого:

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + \frac{Ze^2}{r} + E \right\} R_{nlj}(r) = [W_r + W_{so} + W_c] R_{nlj}(r), \quad (9.13)$$

$$\text{де} \quad W_{so} = \frac{Ze^2 \hbar^2}{4m_0^2 c^2 r^3} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right], \quad \text{бо} \quad s(s+1) = \frac{3}{4}, \quad (9.14)$$

а W_r та W_c визначаються з (9.7) та (9.9). У правій частині рівняння (9.13) знаходяться оператори, що мають порядок $\left(\frac{v}{c}\right)^2$, тому розв'язок цього рівняння можна знайти за допомогою теорії збурень.

Нульове наближення задачі отримуємо, якщо припустити, що права частина рівняння (9.13) дорівнює нулю. Отримуємо відоме в теорії Шредінгера радіальне рівняння для енергії та хвильової функції електрона.

Енергія електрона в нульовому наближенні визначається формулою (9.1), а радіальна функція в цьому наближенні не залежить від квантового числа j :

$$R_{nlj} \equiv R_{nl} = C_{nl} e^{-\frac{1}{2}\rho} \rho^l Q_{n-l-1}^{2l+1}(\rho), \quad (9.15)$$

$$\text{де} \quad Q_k^s(\rho) = e^\rho \rho^{-s} \frac{d^k}{d\rho^k} (e^{-\rho} \rho^{k+s}), \quad \rho = \frac{2Z}{na_B} r,$$

$$C_{nl} \equiv \left(\frac{Z}{na_B} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-l-1)!(n+l)!}}.$$

Перша поправка ΔE_{nj} до енергії є діагональним метричним елементом від збурення на хвильових функціях основної задачі:

$$\Delta E_{nj} \equiv E_{nj} - E_n = \int_0^\infty R_{nl}^2(r) (W_r + W_{so} + W_c) r^2 dr. \quad (9.16)$$

При обчисленні інтегралів (9.16) можна використати відомий інтеграл

$$\int_0^\infty e^{-x} x^n dx = n!.$$

Нам необхідно визначити

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^\nu} \right\rangle &= \int_0^\infty R_{nl}^2(r) r^{-\nu+2} dr = C_{nl}^2 \left(\frac{na_B}{2Z} \right)^3 \left(\frac{na_B}{2Z} \right)^{-\nu} \int_0^\infty \rho^{-\nu+1} (-1)^k \times \\ &\times \left\{ \rho^k - k(k+2l+1)\rho^{k-1} + \dots + (-1)^{k-2} \frac{k(k-1)(2l+k+1)!}{2!(2l+3)!} \rho^2 + (-1)^{k-1} \frac{k(2l+k+1)!}{(2l+3)!} \rho + (-1)^k \frac{(2l+k+1)!}{(2l+1)!} \right\} \times \\ &\times \frac{d^k}{d\rho^k} (e^{-\rho} \rho^{k+2l+1}) d\rho \end{aligned}$$

для параметра $\nu = 1, 2, 3$. Отримаємо, що

$$\begin{aligned} \langle r^{-1} \rangle &= \frac{Z}{a_B} \frac{1}{n^2}, \\ \langle r^{-2} \rangle &= \left(\frac{Z}{a_B} \right)^2 \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)}, \\ \langle r^{-3} \rangle &= \left(\frac{Z}{a_B} \right)^3 \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1)}. \end{aligned}$$

Обчислимо тепер доданки для знаходження поправки ΔE_{nj} :

$$\langle nl | W_r | nl \rangle = -\frac{1}{2m_0 c^2} (E_n^2 - 2Ze^2 E_n \langle r^{-1} \rangle + Z^2 e^4 \langle r^{-2} \rangle) = \frac{\alpha^2 Z^4 e^2}{2n^3 a_B} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \right), \quad (9.18)$$

де $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ – стала тонкої структури,

$$\begin{aligned} \langle nl | W_{so} | nl \rangle &= \frac{Ze^2 \hbar^2}{4m_0^2 c^2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle r^{-3} \rangle = \\ &= \frac{\alpha^2 Z^4 e^2}{2n^3 a_B} \frac{\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] (1 - \delta_{l,0})}{l(2l+1)(l+1)}. \end{aligned} \quad (9.19)$$

У формулі (9.19)

$$j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} = \begin{cases} l & \text{якщо } j = l + \frac{1}{2} \\ -(l+1) & \text{якщо } j = l - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (9.20)$$

$$\delta_{l,0} = \begin{cases} 0, & \text{якщо } l \neq 0 \\ 1, & \text{якщо } l = 0. \end{cases}$$

Матричний елемент від контактної взаємодії

$$\langle nl|W_{\tilde{N}}|nl\rangle = \frac{\pi Z e^2 \hbar^2}{2m_0^2 c^2} \int_0^\infty R_{nl}^2(r) \delta(\vec{r}) r^2 dr = \frac{Z \alpha^2 e^2}{8a_B} R_{nl}^2(0) = \frac{Z^4 \alpha^2 e^2}{2n^3 a_B} \delta_{l,0}. \quad (9.21)$$

Отже, для додаткової енергії, в якій враховано релятивістський ефекти, спин-орбітальна та контактна взаємодії, отримуємо

$$\Delta E_{nj} = \frac{Z^4 \alpha^2 e^2}{2n^3 a_B} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l + \frac{1}{2}} + \frac{[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}](1 - \delta_{l,0})}{l(2l+1)(l+1)} + \delta_{l,0} \right).$$

В останній формулі потрібно використати умови (9.20). Тоді для ΔE_{nj} маємо

$$\Delta E_{nj} = -\frac{Z^4 \alpha^2 e^2}{2n^3 a_B} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \quad (9.22)$$

Використовуючи (9.1), (9.16) та (9.22), можемо записати формулу тонкої структури спектра воднево-подібного атома:

$$E_{nj} \equiv E_n + \Delta E_{nj} = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_B} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (9.23)$$

Видно, що релятивістські ефекти при врахуванні доданків порядку $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ стали причиною розщеплення n^2 -кратно виродженого рівня нерелятивістської теорії Шредінгера для частинки без спіна. Крім головного квантового числа n рівень енергії тепер залежить від квантового числа $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ яке визначає повний момент кількості руху електрона в атомі. Тому пари рівнів, що мають однакові n і j при $l = j \pm \frac{1}{2}$ є виродженими. Цікаво, що точний розв'язок рівняння Дірака в кулонівському полі характеризується таким же двократним виродженням енергетичних рівнів.

Через те, що при врахуванні спіна електрона виникає новий ступінь вільності, загальне число енергетичних станів, які відповідають конкретному головному квантовому числу n , дорівнює $2n^2$. При врахуванні спіна електрона позначення " nl " квантового стану частинки в центральносиметричному полі замінюється позначеннями " nl_j ", де квантове число j , що стоїть справа внизу біля латинської букви l , характеризує повний момент електрона в заданому стані. Отже, в атомі водню можливі стани (рис. 3) $1s_{\frac{1}{2}}$; $2s_{\frac{1}{2}}, 2p_{\frac{1}{2}}$; $2p_{\frac{3}{2}}$; $3s_{\frac{1}{2}}, 3p_{\frac{1}{2}}$;

$3p_{\frac{3}{2}}, 3d_{\frac{3}{2}}; 3d_{\frac{5}{2}}$ і т.д. Кожен з цих рівнів $(2j+1)$ -кратно вироджений за магнітним квантовим числом $m = \pm j, \pm(j-1), \dots$

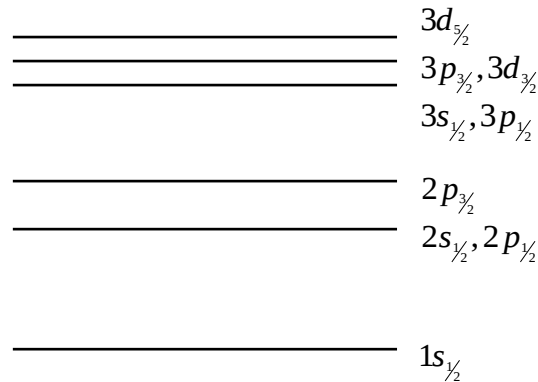


Рис. 3. Схема енергетичних рівнів атома водню.

Система рівнів, що відповідає різним значенням ΔE_{nj} , для однакового головного квантового числа n , називається тонкою структурою. З формули (9.23) можна зробити висновок, що при заданому n «ширина» тонкої структури, тобто відстань між рівнем з $l_{\max} = n-1$, $j_1 = n-1 + \frac{1}{2} = n - \frac{1}{2}$ та рівнем $l_{\min} = 0$, $j_2 = \frac{1}{2}$ дорівнює

$$\Delta E_{nf_1} - \Delta E_{nf_2} = \frac{\alpha^2 Z^4 e^2}{2n^4 a_B} (n-1). \quad (9.24)$$

Відстань між компонентами тонкої структури пропорційна квадрату сталої тонкої структури. Для рівня з $n=2$ атома водню енергетична різниця між станами $2p_{\frac{3}{2}}$ і $2s_{\frac{1}{2}}$, тобто $\Delta E_{2p_{\frac{3}{2}}} - \Delta E_{2s_{\frac{1}{2}}} = \frac{\alpha^2 e^2}{32a_B}$, ($\approx 0,048$ меВ) є досить малою величиною.

Абсолютна величина тонкої структури, як видно з (9.24), швидко зменшується $\left(\propto \frac{1}{n^3} \right)$ з ростом головного квантового числа. Тому розщеплення

спектральних ліній, що відповідають переходам системи між станами з різними величинами n , на експерименті зумовлене розщепленням рівнів найнижчого стану. Зокрема, кожна лінія Бальмера для атома водню, яка виникає через переходи на стан $n=2$, складається з дублетних ліній, відстань між якими $\approx 0,048$ меВ.

Багато експериментальних досліджень тонкої структури проводились оптичними методами, бо вони дають змогу вимірювати зазначені невеликі розщеплення рівнів. Вимірювання підтверджують висновки теорії Дірака про тонку структуру енергетичних станів атома водню.

Застосування радіочастотної техніки до вимірювання величин малих різниць енергій між рівнями поліпшило точність експерименту на 3-4 порядки. Це дозволило Лембу та Різерфорду (1947 р.) достовірно встановити, що всупереч теорії Дірака, рівні $2s_{\frac{1}{2}}$ та $2p_{\frac{3}{2}}$ зміщені один відносно одного приблизно на 10 % від величини тонкої структури. Пояснення відносного зміщення рівнів $2s_{\frac{1}{2}}$ і $2p_{\frac{3}{2}}$, яке називається лембівським зсувом, можна отримати в рамках квантової електродинаміки. Виявилось, що це розщеплення зумовлене радіаційними поправками, тобто взаємодією електрона з вакуумом.

§ 10. Нормальний та аномальний ефект Зеємана

Нерелятивістська теорія Шредінгера дає можливість пояснити нормальний ефект Зеємана, тобто триплетне розщеплення спектральних ліній атомів, які поміщено в магнітне поле.

Повну теорію ефекту Зеємана як аномального (мультиплетне розщеплення спектральних ліній), так і нормального (триплетне розщеплення) можна побудувати лише на основі теорії Дірака, в якій враховано не лише релятивістські, але й спінові ефекти. Оскільки аномальний ефект Зеємана зумовлений спіновими ефектами, тому ні класична, ні нерелятивістська механіка Шредінгера не могли його пояснити.

За основу теорії досить розглянути рівняння Дірака в слабо релятивістському наближенні (9.5), коли враховано спінові ефекти. Нехай в однорідне поле поміщено воднево-подібний атом. Направимо вісь OZ системи координат вздовж напрямку вектора напруженості магнітного поля $\vec{H}$. Тоді $H_x = H_y = 0$, $H_z = H$. Врахування магнітного поля в гамільтоніані задачі проводиться відомим шляхом – заміною оператора імпульса електрона $\hat{p}$ на

$\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}$ ($\vec{A}$ – векторний потенціал поля). Тоді зміниться оператор кінетичної енергії електрона:

$$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_0} \rightarrow \frac{\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_0},$$

$$\frac{\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_0} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{e}{2m_0 c} \left(\hat{\vec{p}} \vec{A} + \vec{A} \hat{\vec{p}} \right) + \frac{e^2}{2m_0 c^2} A^2.$$

Крім того у гамільтоніані необхідно врахувати існування власного механічного моменту (спіна) та власного магнітного моменту електрона. Оператор взаємодії власного магнітного моменту електрона з магнітним полем

$$V_m = -\frac{e\hbar}{2m_0 c} \hat{\vec{\sigma}} \vec{H}. \quad (10.1)$$

де $\hat{\vec{\sigma}}$ – матриці Паулі.

Кожен оператор у рівнянні Дірака діє на хвильову функцію. Розглянемо детальніше

$$\hat{\vec{p}} \vec{A} \psi = -i\hbar \nabla (\vec{A} \psi) = -i\hbar (\psi \nabla \vec{A} + \vec{A} \nabla \psi). \quad (10.2)$$

Для статичного магнітного поля зручно вибрати для $\vec{A}$ калібровку Кулона:

$$\text{div } \vec{A} = \nabla \vec{A} = 0, \quad (10.3)$$

тому (10.2) спроститься:

$$\hat{\vec{p}} \vec{A} \psi = -i\hbar \vec{A} \nabla \psi = \vec{A} \hat{\vec{p}} \psi. \quad (10.4)$$

Врахуємо також, те що у випадку невеликих напруженостей полів доданок

$$\frac{e^2}{2m_0 c^2} A^2 \approx 0.$$

Отже,

$$\frac{\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_0} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \frac{e}{m_0 c} \vec{A} \hat{\vec{p}}. \quad (10.5)$$

Неважко переконатись, що для виконання умови (10.3) необхідно, щоб

$$A_x = -\frac{1}{2}yH, \quad A_y = \frac{1}{2}xH, \quad A_z = 0.$$

Тоді

$$\frac{e}{m_0c} \vec{A} \hat{p} = -\frac{eH}{2m_0c} i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -\frac{e_0H}{2m_0c} \hat{L}_z,$$

де $e_0 = -e$, $e_0 > 0$, а $\hat{L}_z$ – оператор z -ої проекції моменту імпульсу, яка у сферичній системі координат має вигляд:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.6)$$

Враховуючи (10.6), отримуємо, що

$$\frac{e}{m_0c} \vec{A} \hat{p} = i\hbar \frac{e_0H}{2m_0c} \frac{\partial}{\partial \varphi} = i\mu_0H \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (10.7)$$

де $\mu_0 = \frac{e_0\hbar}{2m_0c}$ – магнетон Бора.

Повернемось тепер до оператора кінетичної енергії електрона у магнітному полі. Підставимо (10.7) у рівняння (10.5):

$$\frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m_0} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - i\mu_0H \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.8)$$

З врахуванням (10.1) та (10.8) рівняння Дірака у слабо релятивістському наближенні (9.5) запишеться таким чином:

$$\left(E + \frac{Ze_0^2}{2r} - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = (W_r + W_{so} + W_C + W_m) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (10.9)$$

де W_r, W_{so}, W_C задаються рівняннями (9.7)-(9.9), а $W_m = \mu_0H \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\sigma}_z \right)$,

хвильова функція електрона має вигляд матриці-стовпця. Як і в попередніх випадках, вважаємо, що доданки у правій частині рівняння (10.9) є малими. Тому за допомогою усереднення правої частинки (10.9) можемо знайти, крім додаткової енергії, що визначає тонку структуру,

$$\Delta E_{nj} = \int (\psi_1^* \psi_2^*) (W_r + W_{so} + W_C) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} dV,$$

$$\Delta E_{nj} = -\frac{\alpha^2 Z^4 e^2}{2n^3 a_B} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \quad (10.10)$$

ще й додаткову енергію електрона, зумовлену взаємодією з магнітним полем

$$\Delta E^m = \mu_0 H \int (\psi_1^* \psi_2^*) \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\sigma}_z \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} dV. \quad (10.11)$$

Варто зазначити, що залежно від величини відношення між додатковими енергіями у правій частині (10.9) можна спостерігати виникнення чи аномального (слабке магнітне поле), чи нормального (сильне магнітне поле) **ефекта Зєсмана**.

Нехай напруженість магнітного поля є відносно малою, так що взаємодія електрона з ним є меншою за спін-орбітальну взаємодію і релятивістську поправку до енергії. Тоді за нульове наближення ми повинні взяти хвильову функцію у вигляді:

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = R_{nl} Y_{lm}^{(i)}, \quad (10.12)$$

де $Y_{lm}^{(i)}$ – сферичний спіно́р (9.3). Підставимо (10.12) у рівняння (10.11).

Додаткова енергія ΔE^m представиться виразом:

$$\Delta E^m = \mu_0 H \int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr \int (Y_{lm}^{(i)})^+ \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\sigma}_z \right) Y_{lm}^{(i)} d\Omega. \quad (10.13)$$

Згадаймо, що радіальна частина хвильової функції електрона нормована на одиницю, тому перший інтеграл

$$\int_0^\infty |R_{nl}|^2 r^2 dr = 1.$$

Розглянемо спочатку випадок, коли $j = l + \frac{1}{2}$. Сферичний спіно́р для такого j має вигляд:

$$Y_{lm}^{(i)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix}. \quad (10.14)$$

Проведемо ряд перетворень підінтегральної функції в (10.13). З врахуванням (10.14) маємо

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{\sigma}_z\right)Y_{lm}^{(i)} = \left[-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\right]Y_l^{(j)} = \begin{pmatrix} 1-i\frac{\partial}{\partial\varphi} & 0 \\ 0 & -1-i\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix} \times$$

$$\times \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}}Y_{l,m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1+m-1)\sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}Y_{l,m-1} \\ (1-m)\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}}Y_{l,m} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m\sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}Y_{l,m-1} \\ (1-m)\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}}Y_{l,m} \end{pmatrix}.$$

Тепер

$$\left(Y_{lm}^{(j)}\right)^+ \left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \hat{\sigma}_z\right)Y_{lm}^{(j)} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}Y_{l,m-1}^* & -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}}Y_{l,m-1}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m\sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}Y_{l,m-1} \\ (1-m)\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}}Y_{l,m} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2l+1} \left[m(l+m)|Y_{l,m-1}|^2 + (m-1)(l+1-m)|Y_{l,m}|^2 \right]. \quad (10.15)$$

Підставимо (10.15) в рівняння (10.13). Енергія ΔE^m для квантового числа $j = l + \frac{1}{2}$ записується простою формулою, якщо використати умову нормування сферичних функцій

$$\int |Y_{l,m-1}|^2 d\Omega = \int |Y_{l,m}|^2 d\Omega = 1.$$

Отже,

$$\Delta E^m = \frac{\mu_0 H}{2l+1} [m(l+m) + (m-1)(l+1-m)] = 2\mu_0 H \frac{l+1}{2l+1} \left(m - \frac{1}{2}\right). \quad (10.16)$$

Аналогічно отримуємо, що

$$\Delta E^m = \frac{\mu_0 H}{2l+1} [m(l-m+1) + (m-1)(l+m)] = 2\mu_0 H \frac{l}{2l+1} \left(m - \frac{1}{2}\right), \text{ коли } j = l - \frac{1}{2}. \quad (10.16)$$

Можна переконатись, що для $j = l + \frac{1}{2}$ і коли $j = l - \frac{1}{2}$ квантове число $m_j = m - \frac{1}{2}$. Дійсно, наприклад у першому випадку ($j = l + \frac{1}{2}$)

$$\hat{J}_z Y_{lm}^{(j)} = (\hat{L}_z + \hat{S}_z) Y_{lm}^{(j)} = \begin{pmatrix} -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}}Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}}Y_{l,m} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \left[\hbar(m-1) + \frac{\hbar}{2} \right] \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ \left[-\hbar m + \frac{\hbar}{2} \right] \sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix} = \hbar \left(m - \frac{1}{2} \right) \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m}{2l+1}} Y_{l,m-1} \\ -\sqrt{\frac{l+1-m}{2l+1}} Y_{l,m} \end{pmatrix} = \hbar \left(m - \frac{1}{2} \right) Y_{lm}^{(j)} = \hbar m_j Y_{lm}^{(j)}.$$

Повертаючись до (10.16) та (10.17), можна записати обидва ці вирази в одну формулу

$$\Delta E^m = \mu_0 H g m_j = \hbar \omega_0 g m_j, \quad (10.18)$$

де $\omega_0 = \frac{e_0 H}{2m_0 c}$ – ларморівська частота, а

$$g = \frac{j + \frac{1}{2}}{l + \frac{1}{2}} \quad (10.19)$$

– множник Ланде. Зауважимо, що

$$g = \begin{cases} \frac{l+1}{l + \frac{1}{2}}, & \text{якщо } j = l + \frac{1}{2} \\ \frac{l}{l + \frac{1}{2}}, & \text{якщо } j = l - \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (10.20)$$

З (10.20) отримуємо вихідні формули (10.16) та (10.17). Можна довести, що для атома з будь-якими значеннями спіна частинок, коли оператор повного моменту кількості руху

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S},$$

множник Ланде можна представити формулою

$$g = \left\{ 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right\}. \quad (10.19a)$$

Для випадку $s = \frac{1}{2}$ формули (10.20) та (10.19a) є еквівалентними. Проте співвідношення (10.19a) для множника Ланде є більш загальним.

Отже, для слабкого магнітного поля додаткова енергія електрона, що зумовлена взаємодією з цим полем, визначається множником Ланде, величина якого залежить від стану електрона. Енергія атома в першому наближенні теорії збурень представляється формулою

$$E_{n,j,m_j} = E_{n_j} + \hbar \omega_0 g m_j, \quad (10.21)$$

де $m_j = \pm j, \pm(j-1), \dots$. У магнітному полі кожен рівень з енергією E_{n_j} розщеплюється на $2j+1$ – рівні. Зміщення цих рівнів є симетричним відносно незбуреної величини енергії. Відстань між сусідніми розщепленими рівнями

$$\Delta E = \hbar \omega_0 g \quad (10.22)$$

пропорційна напруженості магнітного поля і множнику Ланде. В табл.1 наведені значення множника Ланде для кількох перших станів електрона.

Таблиця 1. Множник Ланде водневоподібного атома.

Стан	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$
g	2	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{4}{5}$	$\frac{6}{4}$

Розщеплення рівнів енергії згідно з формулою (10.21) називають **аномальним ефектом Зеємана**.

Для частинки без спіна ($s=0$) множник Ланде (див. (10.19а)) дорівнює одиниці. Для цього випадку відстань між сусідніми розщепленими рівнями є однаковою і не залежить від типу півнів:

$$\Delta E = \hbar \omega_0 .$$

Таке розщеплення можна отримати на основі нерелятивістської теорії Шредінгера. Його називають **нормальним ефектом Зеємана**.

На рис. 4. зображено розщеплення спектральних рівнів $1s_{1/2}$ і $2p_{1/2}$ в слабкому магнітному полі. Видно (рис.4.б), що у випадку $g \neq 1$ маємо чотири лінії випромінювання (поглинання) світла (аномальний ефект Зеємана), бо $g_1 = 2$, а $g_2 = \frac{3}{2}$, тому зміщення спектральних ліній за частотою дорівнює:

$$\Delta \omega_1 = \omega_1 - \omega_0 = \frac{2}{3} \omega_0, \quad \Delta \omega_2 = -\frac{4}{3} \omega_0,$$

$$\Delta \omega_3 = \frac{4}{3} \omega_0, \quad \Delta \omega_4 = -\frac{2}{3} \omega_0.$$

Якщо б $g_1 = g_2 = 1$ (рис. 4.в), то ми отримали лише три спектральні лінії (нормальний ефект Зеємана), бо тоді

$$\Delta \omega_1 = \omega_1 - \omega_0 = 0, \quad \Delta \omega_2 = -\omega_0,$$

$$\Delta\omega_3 = \omega_0, \Delta\omega_4 = 0.$$

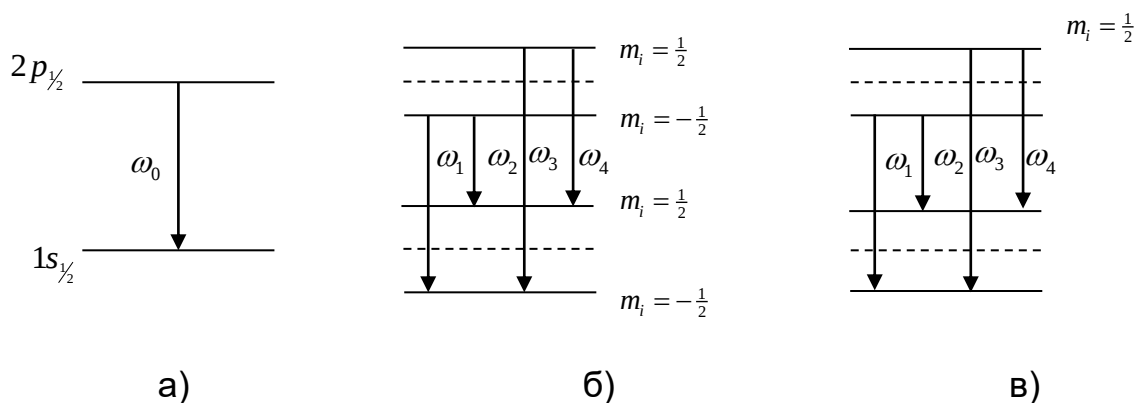


Рис. 4. Ефект Зеємана: а) розташування рівнів без поля; б) аномальний ефект Зеємана; в) нормальний ефект Зеємана.

Нормальний ефект Зеємана спостерігається для деяких станів складних атомів. Стани складних атомів, що мають декілька електронів, в певному наближенні можна характеризувати власними значеннями операторів сумарного спіна всіх електронів $\hat{S} = \sum_i \hat{s}_i$, сумарних орбітальних моментів кількості руху $\hat{L} = \sum_i \hat{L}_i$ і повного моменту $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$. Зміна енергетичних станів таких атомів в слабкому однорідному зовнішньому полі також визначається формулою

$$\Delta E = \hbar\omega_0 g,$$

де

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

Для енергетичних станів з повним спіном $S=0$ (синглетні терми атомів з парним числом електронів) множник Ланде $g=1$. Тоді $\Delta E = \hbar\omega_0$, що відповідає нормальному ефекту Зеємана. Таке розщеплення спостерігається, наприклад, для синглетних термів атомів цинку, кадмію.

Формула для енергії електрона в атомі (10.21) отримана за допомогою теорії збурень. Вона справедлива лише для таких напруженостей магнітного поля, коли величина розщеплення (10.22) буде меншою за різницю енергій сусідніх рівнів без поля. Тобто, для цього повинна виконуватись умова

$$\hbar\omega_0 \propto |E_{n_{j2}} - E_{n_{j1}}|.$$

Характерна відстань між рівнями атома водню відповідає тонкій структурі

$$E_{2p_{3/2}} - E_{2p_{1/2}} \approx 0,45 \text{ меВ} \approx 10^{-16} \text{ ерг.}$$

Аномальний ефект Зеемана повинен спостерігатись в таких магнітних полях, в яких величина розщеплення, що спричинена магнітним полем, буде меншою за відстань між компонентами дублета. Якщо врахування, що

$$\frac{e\hbar}{2m_0c} \approx 9 \cdot 10^{-24} \text{ ерг,}$$

то слабкими магнітними для перших збуджених рівнів атома водню потрібно вважати поля з напруженість магнітного поля $H < 10^3 \text{ Е.}$

У випадку сильних полів, коли розщеплення через дію зовнішнього магнітного поля більше розщеплення, що спричинене спіно-орбітальною взаємодією

$$\Delta E^m \propto \Delta E_{SO},$$

магнітне поле «розриває» спіно-орбітальний зв'язок і розв'язок нульової задачі рівняння Дірака (10.9) не представляється через сферичні спінори (10.14).

У рівнянні (10.9) можна знехтувати доданками W_r , W_{SO} , W_C . Тоді рівняння задачі запишеться у вигляді:

$$\left(E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \mu_0 H \left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\sigma}_z \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (10.23)$$

Переконаємось, що ψ_1 та ψ_2 можна виразити через сферичні функції $Y_{l,m}$:

$$\psi_1 = R(r)Y_{l,m_1}(\vartheta, \varphi), \quad \psi_2 = R(r)Y_{l,m_2}(\vartheta, \varphi). \quad (10.24)$$

Підставимо (10.24) в (10.23), враховуючи, що

$$-i \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{l,m} = m Y_{l,m}. \quad (10.25)$$

Для невідомих функцій ψ_1 і ψ_2 можна отримати незалежні рівняння, якщо врахувати, крім (10.25), що

$$\left(-i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\sigma}_z \right) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \left[-i \frac{\partial}{\partial \varphi} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Отже,

$$\begin{aligned} \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \mu_0 H(m_1 + 1) \right] \psi_1 &= 0, \\ \left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hat{p}^2}{2m_0} - \mu_0 H(m_2 - 1) \right] \psi_2 &= 0. \end{aligned} \quad (10.26)$$

З точністю до сталих величин, які залежать від напруженості магнітного поля, обидва рівняння збігаються з рівняннями Шредінгера для воднево-подібного атома. Тому можемо легко знайти значення енергії

$$E_{1,2} = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar n^2} + \mu_0 H(m_{1,2} + 2m_s), \quad (10.27)$$

а також відомий вигляд радіальної хвильової функції:

$$R = R_{nl}(r). \quad (10.28)$$

Розв'язки (10.27) відповідають двом можливим випадкам орієнтації спіна електрона. Якщо спін направлений вздовж магнітного поля, то електрон описується хвильовою функцією ψ_1 і тоді $m_s = \frac{1}{2}$. Якщо спін направлений проти напруженості поля, то маємо стан ψ_2 та $m_s = -\frac{1}{2}$. Щоб обом розв'язкам ψ_1 та ψ_2 відповідала одна і та ж енергія електрона, необхідно ввести нове квантове число $m \equiv m_1 + 1$, $m \equiv m_2 - 1$. Тоді енергія електрона (10.27) запишеться у вигляді:

$$E_{n,m} = -\frac{m_0 Z^2 e^4}{2\hbar n^2} + \mu_0 H m, \quad (10.29)$$

а хвильові функції

$$\psi_1 = R_{nl} Y_{l,m-1}, \quad \psi_2 = R_{nl} Y_{l,m+1}$$

є ортогональними між собою через ортогональність сферичних функцій $Y_{l,m-1}$ та $Y_{l,m+1}$,

$$\int Y_{l,m-1}^* Y_{l,m+1} d\Omega = 0,$$

бо $m+1 \neq m-1$.

Отже, кожен енергетичний рівень E_{nl} розщеплюється на $2l+3$ еквівалентних компонент, що відповідає $2l+3$ можливим значенням суми

квантових чисел $m_l + 2m_s \equiv m$, оскільки $m_s = \pm \frac{1}{2}$ і при заданому l такими числами будуть $l+1, l, l-1, \dots, -(l+1)$.

Умова $m=l+1$ виконується при $m_s = \frac{1}{2}$, а $m=-l-1$, якщо $m_s = -\frac{1}{2}$. Всі інші значення m реалізуються для обох величин $m_s = \pm \frac{1}{2}$. Виходячи з цього, маємо, що з усіх розщеплених рівнів найвищий та найнижчий є не виродженими, а всі інші – двократно вироджені.

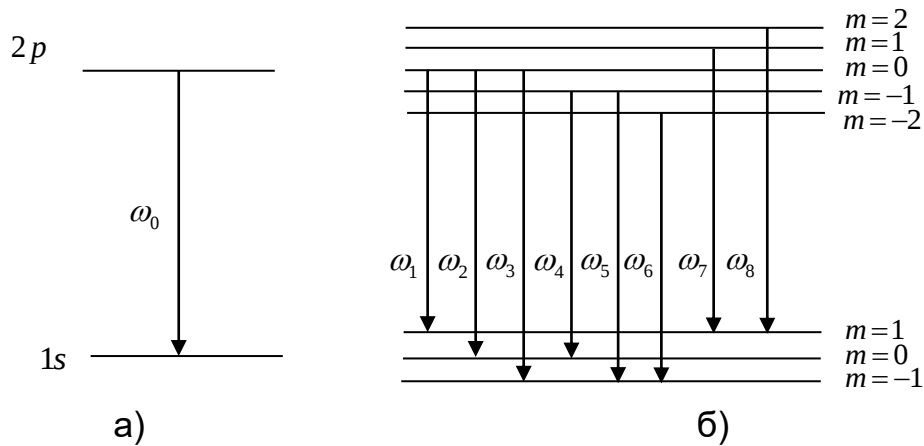


Рис. 5. Ефект Зеемана: а) розташування рівнів без поля; б) розташування ліній в сильному полі.

Розглянемо схему можливих переходів атома між основним $1s$ -станом та першим збудженим станом ($2p$) при дії на нього ще й електромагнітної хвилі (рис. 5). У сильному магнітному полі кожен енергетичний рівень розщеплюється на $2l+3$ рівні. Стан з $l=0$ представиться трьома рівнями, а стан з $l=1$ – п'ятьма рівнями. Всі рівні розташовані на однаковій відстані $\hbar\omega_0$. Згідно з правилами відбору в дипольному наближенні переходи електрона дозволені тоді, коли

$$\Delta m = 0, \pm 1.$$

З рисунка видно, що буде вісім таких переходів. Визначимо різницю частот переходів з вихідною частотою переходу атома без поля. Маємо, що

$$\Delta\omega_1 = \omega_1 - \omega = -\omega_0; \Delta\omega_2 = 0; \Delta\omega_3 = \omega_0; \Delta\omega_4 = 0;$$

$$\Delta\omega_5 = \omega_0; \Delta\omega_6 = 0; \Delta\omega_7 = 0; \Delta\omega_8 = \omega_0.$$

Незважаючи на багатство енергетичного спектру атома в магнітному полі, при експериментальному вимірюванні отримаємо лише три спектральні лінії – нормальний ефект Зеемана.

Розщеплення рівнів (10.29) повинно спостерігатись в сильних магнітних полях. Таке розщеплення називають **ефектом Пашена-Бака**. Воно спостерігається для деяких рівнів атомів Li , Na , O в магнітних полях з напруженостями магнітного поля, що відповідно більші за $3,6 \cdot 10^4$ Е; $4 \cdot 10^4$ Е; $9 \cdot 10^4$ Е.

§ 11. Точний розв'язок рівняння Дірака для вільної частинки

Рівняння Дірака для вільної частинки має вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (11.1)$$

де гамільтоніан задається формулою:

$$\hat{H} = c \hat{\alpha} \hat{p} + \hat{\alpha}_0 m_0 c^2, \quad (11.2)$$

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (11.3)$$

$\hat{\sigma}_i$ – матриці Паулі, $i = x, y, z$.

Вільний рух можна розглядати як частинний випадок руху під дією центральних сил, тому обох випадках виконується закон збереження повного моменту

$$\hat{J} = \vec{r} \times \hat{p} + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}. \quad (11.4)$$

На мові квантової механіки це означає, що оператор повного моменту імпульсу $\hat{J}$ комутує з гамільтоніаном частинки $\hat{H}$.

Ми можемо виключити з розгляду орбітальний момент імпульсу $\vec{r} \times \hat{p}$, якщо розглянемо проекцію повного моменту на напрямок імпульсу, оскільки проекція орбітального моменту по напрямках імпульсу дорівнює нулеві

$$\hat{p}(\vec{r} \times \hat{p}) = \hat{p}_x(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) - \hat{p}_y(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) + \hat{p}_z(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x) = 0.$$

Введемо для подальших обчислень оператор проекції моменту повного імпульсу на напрямок імпульсу

$$\hat{S}_p = \frac{\left(\hat{J}_{\vec{p}} \right)}{p} = \frac{\hbar \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right)}{2p} = \frac{\hbar \left(\hat{\sigma} \vec{V} \right)}{2ik}, \quad p = \hbar k. \quad (11.5)$$

У зв'язку з тим тут і надалі розглядаються чотирирядні матриці, то оператори $\hat{\sigma}$ в рівнянні (11.5) є матрицями Паулі, що домножені на одиничну матрицю I (11.3).

Оператор $\hat{S}$ комутує з гамільтоніаном вільної частинки $\hat{H}$. Дійсно, обчислимо добуток операторів для першого комутатора:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right) \left(\hat{\alpha}_{\vec{p}} \right) &= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_{\vec{p}} \\ \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right)^2 \\ \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right)^2 & 0 \end{pmatrix}, \\ \left(\hat{\alpha}_{\vec{p}} \right) \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right) &= \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_{\vec{p}} \\ \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_{\vec{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right)^2 \\ \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right)^2 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Бачимо, що вони рівні між собою. Аналогічно для другого комутатора маємо:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right) \hat{\alpha}_0 &= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_{\vec{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_{\vec{p}} \end{pmatrix}, \\ \hat{\alpha}_0 \left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right) &= \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_{\vec{p}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{\vec{p}} & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma}_{\vec{p}} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

Таким чином,

$$\left[\hat{S}_p, \hat{H} \right] = \frac{\hbar c}{2p} \left[\left[\left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right), \left(\hat{\alpha}_{\vec{p}} \right) \right] + \frac{\hbar m_0 c^2}{2p} \left[\left(\hat{\sigma}_{\vec{p}} \right), \hat{\alpha}_0 \right] \right] = 0. \quad (11.6)$$

Як і в теорії Шредінгера, розв'язок рівняння Дірака (11.1) для вільної частинки шукаємо у вигляді плоскої хвилі:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \hat{a}(\vec{k}) e^{-ic\vec{k}t} e^{i\vec{k}\vec{r}}, \quad (11.7)$$

де $\hat{a}(\vec{k})$ – одностовпцева матриця

$$\hat{a}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a_1(\vec{k}) \\ a_2(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1(\vec{k}) \\ b_2(\vec{k}) \\ b_3(\vec{k}) \\ b_4(\vec{k}) \end{pmatrix}$$

$V = L^3$ – об'єм куба великого розміру (пригадаймо нормування хвильової функції нерелятивістської вільної частинки на одиницю), складові хвильового вектора знаходяться з рівнянь

$$k_i = \frac{2\pi}{L} n_i, \quad n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad i = 1, 2, 3.$$

Умова нормування

$$\int \phi^+(\vec{r}) \phi(\vec{r}) dV = 1,$$

зводиться до рівняння

$$a^+ a = |a_1|^2 + |a_2|^2 = |b_1|^2 + |b_2|^2 + |b_3|^2 + |b_4|^2 = 1. \quad (11.8)$$

Енергія частинки пов'язана з величинами ε та K формулою:

$$E = c\hbar\varepsilon K. \quad (11.9)$$

Виберемо K у вигляді:

$$K = \sqrt{k^2 + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2}} \equiv \sqrt{k^2 + k_0^2}, \quad k^2 = k_1^2 + k_2^2 + k_3^2, \quad (11.10)$$

а параметр ε визначимо нижче. Вище ми довели, що оператор проекції моменту імпульса частинки (а реально спіну) на напрямок її імпульсу комутує з гамільтоніаном $\hat{H}$. Згадуючи відому теорему, про спільність власних функцій операторів, які комутують між собою, приходимо до висновку, що плоска хвиля (11.7) є власною функцією оператора $\hat{S}_p$

$$\frac{\hbar(\hat{\vec{\sigma}}\vec{\nabla})}{i2k} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = S_p \phi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (11.11)$$

де S_p – власне значення оператора $\hat{S}_p$. підставимо $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ з (11.7) в рівняння (11.11). Враховуючи те, що $\vec{\nabla} e^{i\vec{k}\vec{r}} = i\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}}$,

$$\left[(\hat{\vec{\sigma}}\vec{p}) - 2kS_p \right] \hat{a} = 0, \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (11.12)$$

Підстановка (11.7) у рівняння Дірака дозволяє звести його до такого

$$\left[c(\hat{\vec{\alpha}}\hat{\vec{p}}) + \hat{\alpha}_0 m_0 c^2 - c\hbar\epsilon K \right] \hat{a} = 0. \quad (11.13)$$

Розглянемо детальніше рівняння (11.12):

$$\left[\begin{pmatrix} \hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{p}} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 2k\hat{S}_p & 0 \\ 0 & 2k\hat{S}_p \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0.$$

яке еквівалентне двом рівнянням

$$(\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{p}} - 2k\hat{S}_p)a_1 = 0, \quad (\hat{\vec{\sigma}}\hat{\vec{p}} - 2k\hat{S}_p)a_2 = 0. \quad (11.14)$$

Отримали два еквівалентні матричні рівняння.

Деталізуємо, наприклад, перше рівняння, враховуючи, що $\hat{\vec{\sigma}}$ – матриці

Паулі, а $a_1 = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ – одностовпцева матриця,

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & p_x \\ p_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -ip_y \\ ip_y & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -2kS_p + p_z & 0 \\ 0 & -2kS_p - p_z \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (11.15)$$

Рівняння (11.15) еквівалентне системі двох однорідних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} (-2kS_p + p_z)b_1 + p_- b_2 = 0 \\ p_+ b_1 + (-2kS_p - p_z)b_2 = 0 \end{cases} \quad (11.16)$$

де $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$.

Система (11.16) має нетривіальний розв'язок, якщо її визначник дорівнює нулеві, тому

$$\begin{vmatrix} -2kS_p + p_z & p_- \\ p_+ & -2kS_p - p_z \end{vmatrix} = 0,$$

$$4k^2 S_p^2 - p_z^2 - p_+ p_- = 0,$$

або

$$4k^2 S_p^2 - p^2 = 0.$$

З цього рівняння знаходимо як і слідувало очікувати, що проекція спіна електрона на визначений напрямок $\vec{p}$

$$S_p = \pm \frac{\hbar}{2} \equiv \sigma \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma = \pm 1. \quad (11.17)$$

З рівняння (11.13) визначимо параметр ε . Це рівняння можна записати у вигляді:

$$\left[c \begin{pmatrix} 0 & \hat{\hat{\sigma}}\hat{\hat{p}} \\ \hat{\hat{\sigma}}\hat{\hat{p}} & 2 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} - c\hbar\varepsilon K \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Якщо перемножити матриці та врахувати умови (11.14), то маємо таку систему рівнянь:

$$\begin{cases} (m_0 c^2 - c\hbar\varepsilon K) a_1 + 2ckS_p a_2 = 0 \\ 2ckS_p a_1 - (m_0 c^2 + c\hbar\varepsilon K) a_2 = 0 \end{cases}. \quad (11.18)$$

Визначник цієї системи дорівнює нулеві, коли

$$\varepsilon = \pm 1. \quad (11.19)$$

Параметр ε визначає знак енергії системи.

Для визначення матриці $\hat{a}(\vec{k})$ запишемо її у вигляді:

$$\hat{a}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} b_1(\vec{k}) \\ b_2(\vec{k}) \\ b_3(\vec{k}) \\ b_4(\vec{k}) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c_1 d_1 \\ c_2 d_2 \\ c_3 d_3 \\ c_4 d_4 \end{pmatrix}. \quad (11.20)$$

Тоді рівняння (11.16) та (11.18) з врахуванням позначень (11.10) (11.17) спростяться

$$\begin{cases} (p_z - p\sigma) d_1 + p_- d_2 = 0 \\ p_+ d_1 - (p_z + p\sigma) d_2 = 0 \end{cases} \quad (11.21)$$

$$\begin{cases} (k_0 - \varepsilon K) c_1 + k\sigma c_2 = 0 \\ k\sigma c_1 - (k_0 - \varepsilon K) c_2 = 0 \end{cases}, \quad \varepsilon = \pm 1, \sigma = \pm 1. \quad (11.22)$$

Запишемо тепер умову нормування (11.8), враховуючи (11.20)

$$\hat{a}^+ \hat{a} = |b_1|^2 + |b_2|^2 + |b_3|^2 + |b_4|^2 = \frac{1}{4} (|c_1|^2 + |c_2|^2) (|d_1|^2 + |d_2|^2) = 1. \quad (11.23)$$

З вигляду (11.21), (11.22) видно, що коефіцієнти d_i та c_i ($i=1, 2$) є незалежними, тому

$$\frac{1}{2}(|c_1|^2 + |c_2|^2) = 1, \quad (11.24)$$

$$\frac{1}{2}(|d_1|^2 + |d_2|^2) = 1. \quad (11.25)$$

Умови нормування (11.24), (11.25) та рівняння (11.21), (11.22) дають можливість встановити, що

$$c_1^{(k)} = \sqrt{1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}}, \quad c_2^{(k)} = \varepsilon \sigma \sqrt{1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}}, \quad (11.26)$$

$$d_1^{(k)} = \sigma e^{-\frac{1}{2}\varphi} \sqrt{1 + \sigma \cos \vartheta}, \quad d_2^{(k)} = e^{\frac{1}{2}\varphi} \sqrt{1 - \sigma \cos \vartheta}, \quad (11.27)$$

де ϑ і φ – сферичні кути вектора $\vec{p}$ ($p_z = p \cos \vartheta$, $p_{\pm} = p e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta$). Якщо вектор імпульсу збігається з віссю OZ системи координат, то

$$d_1 = \sigma \sqrt{1 + \sigma}, \quad d_2 = \sqrt{1 - \sigma}, \quad \sigma = \pm 1. \quad (11.27)$$

Тепер можемо записати матрицю $\hat{a}$ (11.20) для двох напрямків спіна частинки (додатної проекції спіна ($\sigma = +1$) та від'ємної – ($\sigma = -1$)). Отже

$$\hat{a}(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \left(1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ \left(1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{якщо } \sigma = 1, \quad (11.28)$$

$$\hat{a}(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \left(1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ -\left(1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad \text{якщо } \sigma = -1, \quad (11.29)$$

Знак величини ε визначає знак енергії електрона. Можна довести, матриці $\hat{a}(\vec{k}, \sigma, \varepsilon)$ задовольняють умові ортонормованості

$$\hat{a}^+(\vec{k}, \sigma', \varepsilon') \hat{a}(\vec{k}, \sigma, \varepsilon) = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{\varepsilon, \varepsilon'}.$$

Якщо спін електрона однозначно не визначений, то хвильову функцію частинки потрібно записати у вигляді лінійної комбінації

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2V}} \left[C_1 \begin{pmatrix} \left(1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ \left(1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \end{pmatrix} + C_{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \left(1 + \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ -\left(1 - \varepsilon \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \right] e^{-\varepsilon c K t + i k z}, \quad \varepsilon = \pm 1.$$

У нерелятивістському наближенні для додатних значень енергії ($\varepsilon = 1$)

$$E = c\hbar\sqrt{k^2 + k_0^2}, \quad k^2 \ll k_0^2.$$

Можемо в розкладі Тейлора за параметром $\frac{k^2}{k_0^2}$ величини $\left(1 \pm \frac{k^2}{k_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}$

обмежитись двома членами розкладу:

$$\left(1 \pm \frac{k_0}{K}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(1 \pm \frac{k_0}{\sqrt{k_0^2 + k^2}}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{k^2}{k_0^2}}}\right)^{\frac{1}{2}} \approx \left(1 \pm 1 \mp \frac{1}{2} \frac{k^2}{k_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Тоді матриці

$$\hat{a}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \left(2 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{k_0^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ \frac{k}{\sqrt{2}k_0} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma = 1,$$

$$\hat{a}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \left(2 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{k_0^2}\right)^{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ -\frac{k}{\sqrt{2}k_0} \end{pmatrix}, \quad \sigma = -1,$$

характеризуються тим, що $|a_1|^2 = \frac{1}{2} \left(2 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{k_0^2} \right) \square |a_2|^2 = \frac{k^2}{2k_0^2} \square 1$. Отже, дві (b_3 ($\sigma=1$) і b_4 ($\sigma=-1$)) з чотирьох компонент хвильової функції стають малими у порівнянні з іншими двома (b_1 ($\sigma=1$) і b_2 ($\sigma=-1$)). Зрозуміло, що для станів з від'ємною енергією ($\varepsilon=-1$), навпаки, функції $b_1(k)$ і $b_2(k)$ – великими.

§ 12. Стани з від'ємною енергією. Відкриття позитрона

Теорія Дірака, що ґрунтується на постульованому рівнянні, дає можливість зробити висновок про існування розв'язків як додатною, так і від'ємною енергією.

$$E = \pm c\hbar K. \quad (12.1)$$

Аналогічний результат є характерним для будь-якої релятивістської теорії, включаючи спеціальну теорію відносності. Дійсно, в релятивістській механіці енергія вільної частинки пов'язана з масою спокою та імпульсом формулами

$$\begin{aligned} E^2 &= p^2 c^2 + m_0^2 c^4, \\ E &= \pm \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Два проміжки зміни енергії при зміні імпульсу $0 \leq p \leq +\infty$ є розділеними інтервалом енергії $2m_0 c^2$. Стани, що відповідають від'ємній енергії, на перший погляд видаються не реальними (не фізичними), оскільки область від'ємних енергій може поширюватись до безмежності ($E \rightarrow -\infty$) і тоді не існує найменшого значення енергій стану. Це означає, що ні одне зі звичайних станів не може бути стійким, бо завжди можливий спонтанний перехід у стан з меншою енергією. Крім того, частинка з від'ємною масою (від'ємною енергією) повинна мати дивні властивості. Зокрема, притягуючись частинкою з додатною масою, вона повинна її відштовхувати. При гіпотетичній взаємодії двох електронів, що характеризуються різним знаком маси, електрон з додатною масою повинен «втікати», а електрон з від'ємною масою повинен його «доганяти», так, щоб центр ваги (з врахуванням від'ємної маси) залишався б нерухомим.

У класичній фізиці стани з від'ємною енергією особливих труднощів не викликають, бо при русі частинки її енергія може змінюватись лише неперервно і переходи з стану з додатною енергією в стан з від'ємною енергією, коли енергія змінюється стрибком на величину $\Delta E \geq 2m_0c^2$ є неможливим. Тому, відкинувши з розгляду в початковий момент часу стани з від'ємною енергією, ми можемо і надалі їх взагалі не розглядати.

Інша ситуація в квантовій теорії, згідно з якою можливі переходи між станами неперервного та дискретного спектру. Тепер стани з від'ємною енергією не можна механічно відкинути, бо ймовірність переходів між рівнями з енергією $+m_0c^2$ і $-m_0c^2$ є відмінними від нуля.

Щоб виключити переходи електронів в стани з від'ємною енергією, Дірак запропонував вважати всі рівні з від'ємною енергією заповненими електронами (рис. 6), тому електрони з додатною енергією не можуть за звичайних умов переходити на ці рівні.

Нехай гама-квант з енергією $E > 2m_0c^2$ взаємодіє з електроном вакууму, тобто електроном з від'ємною енергією, і переводить його в стан з додатною енергією. У цьому випадку замість поглинутого, наприклад, ядром γ -кванта (рис. 7) виникає електрон з додатною енергією і одночасно «дірка» у фоні заповнених електронами від'ємних енергетичних рівнів.

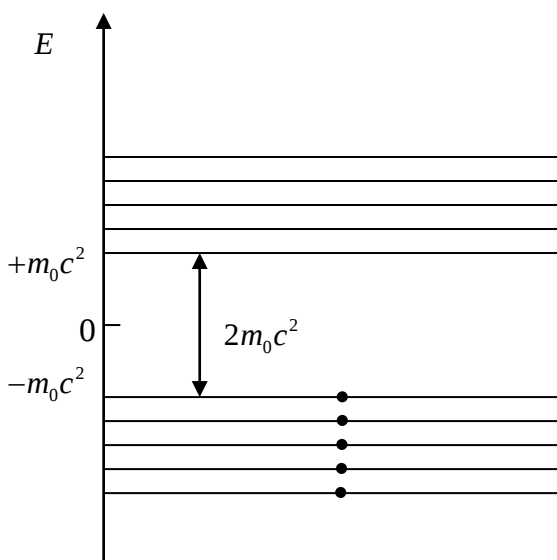


Рис. 6. Схема нульового стану електрон-позитронного вакууму.

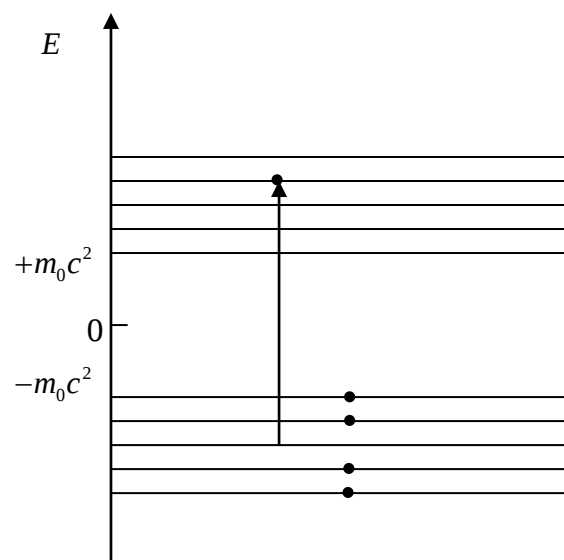


Рис. 7. Схема утворення електрон-позитронної пари.

Визначальний успіх гіпотези Дірака полягає у тому, що він «дірку» інтерпретував як частинку з доданою масою, що дорівнює масі електрона, але з зарядом, який протилежний заряду електрона (позитрон).

Дійсно, нехай в початковий момент часу частинки відсутні, тоді «нульова» енергія фону вакууму E_V дорівнює сумі енергій електронів у від'ємних енергетичних станах n_- :

$$E_V = \sum_{n'_-} E_{n'_-}, \quad (12.3)$$

а заряд вакууму дорівнює

$$e_V = -\sum_{n'_-} e_0, \quad e_0 > 0.$$

Отже, коли реальна частинка відсутня з точки зору теорії «дірок», то це означає, що всі стани з додатною енергією вільні, а всі стани з від'ємною енергією зайняті. Цей стан системи ми будемо вважати нульовим станом (рис. 6).

При переході електрона зі стану з від'ємною енергією E_{n_-} в стан з додатною енергією E_{n_+} загальна зміна енергії системи

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{n_+} + \sum_{n'_- \neq n_-} E_{n'_-} - \sum_{n'_-} E_{n'_-}, \\ \Delta E &= E_{n_+} - E_{n_-} = E_{n_+} + |E_{n_-}|, \quad E_{n_-} < 0. \end{aligned} \quad (12.4)$$

буде дорівнювати сумі додатніх енергій двох частинок, що утворились. Аналогічні міркування для заряду

$$\Delta e = -e_{n_+} - \sum_{n'_- \neq n_-} e_0 - \left(-\sum_{n'_-} e_0 \right) = -e_{n_+} + e_{n_-} = -e_0 + e_0, \quad (12.5)$$

показують, що знак заряду однієї з утворених частинок («дірки») протилежний до знаку заряду іншої частинки (електрона). Як і слідувало очікувати, згідно з законом збереження заряду $\Delta e = 0$.

Отже, перехід електрона з стану з від'ємною енергією в стан додатною енергією після поглинання γ -кванта з більшою енергією, ніж $2m_0c^2$, супроводжується народженням двох частинок. Тоді незаповнений стан електрона з від'ємною енергією («дірка») може розглядатись як стан, зайнятий

частинкою з додатним зарядом $+e_0$ і додатною енергією. Така частинка була передбачена Діраком (1931 р.) і отримала назву «позитрон». Частинка була відкрита Андерсоном (1932 р.) в космічних променях.

Таким чином, теорія Дірака природно включає до розгляду поряд з електроном (частинкою) і позитрон (античастинку). Хвильова функція позитрона знаходиться з рівняння Дірака з позитивним значення енергії і додатним знаком заряду.

Рівняння Дірака для позитрона електромагнітному поля має вигляд:

$$+i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[c \hat{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \hat{\alpha}_0 m_0 c^2 - e\phi \right] \psi$$

Воно відрізняється від рівняння Дірака для електрона знаком заряду – заміною заряду e на $-e$. Після розв'язку цього рівняння стани з доданою енергією відносяться до станів позитрона, а стани з від'ємною енергією – до станів електрона.

Зазначимо, що теорія Дірка, яка представлена вище, не виключає можливості оберненого процесу. За наявності «дірки» електрон з додатною енергією може перейти на вільний рівень станів з від'ємною енергією. Тоді електрон і позитрон перетворюються в γ -кванти. При такому перетворенні повинні виконуватись закони збереження енергії та імпульса, тому буде виникати не менше двох γ -квантів.

Блискуче і певному наближенні кількісне узгодження експерименту та теорії позитронів Дірака вказує на те, що теорія до деякої міри описує реальність. Однак ця теорія містить ряд принципівих недоліків. Хоч вона і розглядала процес народження пари як процес переходу електрона з одного стану в іншу, однак для опису експерименту необхідно було вводити безмежне число електронів у станах з від'ємною енергією. Отже, спроба штучного збереження уявлення про одну незмінну частинку, що переходить з одного стану в іншу, обов'язково була пов'язана з введенням станів з від'ємною енергією, які не мають фізичного змісту, та не спостережуваного фону безмежності густини електронів.

Труднощів одночастинкової теорії Дірака уникає сучасна квантова теорія поля. Методами вторинного квантування вона дозволяє досліджувати системи зі змінним числом частинок. Ця теорія повніше описує явища природи.

Приклади розв'язування задач

Задача 1. Показати, що якщо $\Psi^\pm(r, t)$ є хвильовим пакетом, що складений із частинних розв'язків рівняння Кляйна-Гордона, що відповідають енергії (або частоті) визначеного знака ($E \geq m_0 c^2$, або $E \leq -m_0 c^2$), то незалежно від конкретного виду такої суперпозиції величина, що зберігається зі зміною часу

$$Q^\pm = \int \rho^\pm(\vec{r}, t) dV = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \int \left\{ \Psi^{(\pm)*} \frac{\partial \Psi^\pm}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{(\pm)*}}{\partial t} \Psi^\pm \right\} dV,$$

не змінює свого знаку.

Розв'язування

Загальний Розв'язування рівняння Кляйна-Гордона можна представити у вигляді суперпозиції

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi^+(\vec{r}, t) + \Psi^-(\vec{r}, t), \text{ де } \Psi^\pm(\vec{r}, t) = \int a^\pm(k) \Psi_k^\pm(\vec{r}, t) d^3k, \quad (1)$$

а частинні розв'язки цього рівняння,

$$\Psi_k^\pm = e^{\pm i(\vec{k}\vec{r} - \omega(\vec{k})t)}, \quad \omega(\vec{k}) = \sqrt{k^2 c^2 + \left(\frac{m_0 c^2}{\hbar}\right)^2} > 0$$

утворюють повну систему функцій.

Функція Ψ_k^+ описує частинку, що має імпульс $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ і енергію $E = \hbar \omega \geq m_0 c^2$. Функція Ψ_k^- формально відповідає стану частинки з енергією $E = -\hbar \omega \leq -m_0 c^2$ та імпульсом $-\hbar \vec{k}$. Такий розв'язок рівняння після виконання операції зарядового спряження відноситься вже до стану античастинки, що має енергію $E = \hbar \omega \geq m_0 c^2$ і імпульс $\hbar \vec{k}$. Нагадуємо, що загальний розв'язок рівняння Клейна-Гордона має лише формальний зміст, бо воно не описує ніякого одночастинкового стану. Одночастинкові стани описуються лише функціями $\Psi_k^+(\vec{r}, t)$ і $\Psi_k^-(\vec{r}, t)$ окремо.

Обмежуючись у виразі (1) суперпозиціями Ψ^+ і Ψ^- окремо, підставимо їх у вираз для Q , який наведений в умові задачі. Елементарне інтегрування з використанням формули

$$\int e^{\pm i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} d^3r = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

приводить до наступного співвідношення:

$$Q^\pm = \pm (2\pi)^3 \frac{\hbar}{m_0 c^2} \int \omega(\vec{k}) |a^\pm(\vec{k})|^2 d^3k.$$

Видно, що $Q^\pm$ дійсно мають визначений, але різний для функцій $\Psi^\pm$ знак. Однак підінтегральний вираз $\rho^\pm(\vec{r}, t)$ у координатному представленні для $Q^\pm$ такою властивістю, узагалі кажучи, не володіє (тобто не є знаковизначиним), так що ρ^+ , як і ρ^- , не можна інтерпретувати як густину імовірності.

У випадку заряджених частинок величинам $\rho^\pm(\vec{r}, t)$ можна дати наочну інтерпретацію, зв'язавши їх з об'ємною густиною заряду. Для частинки, що має заряд e , вираз $e\rho^+(\vec{r}, t)$ при нормуванні $Q^+ = 1$ можна розглядати як густину заряду у відповідному одночастинковому стані. Величина $e\rho^-$ описує густину заряду у відповідному стані античастинки. При цьому нормування $Q^- = -1$ автоматично забезпечує протилежні знаки зарядів частинки і відповідної їй античастинки.

Для нейтральних частинок наочна інтерпретації локальних величин $\rho^\pm(\vec{r}, t)$, узагалі кажучи, неможлива. Однак цю обставину не слід розглядати як недолік теорії, тому що локальні просторові характеристики в релятивістській теорії, як зазначалося, не мають глибокого фізичного змісту. З цієї причини в релятивістських теоріях фізичний зміст хвильової функції частинки як амплітуди імовірності зберігається лише в імпульсному (але не в координатному!) представленні.

Задача 2. Одержати вираз для середнього значення енергії вільної безспінової частинки в довільному стані, який описується розв'язком $\Psi^+(\vec{r}, t)$ рівняння Кляйна-Гордона.

Розв'язування

Для виводу шуканого співвідношення скористаємося тим, що для вільної частинки хвильова функція в імпульсному представленні має вигляд

$$a^+(\vec{p}, t) = a^+(\vec{p}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon(p) t\right\} \quad (1)$$

Як і в нерелятивістській квантовій механіці, $a^+(\vec{p}, t)$ має звичайний зміст амплітуди ймовірностей імпульсів. Тому при нормуванні цієї хвильової функції умовою

$$\int |a^+(\vec{p}, t)|^2 d^3 p = 1 \quad (2)$$

середнє значення енергії частинки знаходиться звичайним способом

$$\bar{\varepsilon} = \int \varepsilon(p) |a^+(p, t)|^2 d^3 p = \int a^{+*}(p, t) \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} a^+(p, t) d^3 p. \quad (3)$$

Тепер зазначимо, що в координатному представленні хвильова функція $\Psi^+(\vec{r}, t)$ довільного стану вільної частинки описується суперпозицією позитивно частотних розв'язків рівнянь Кляйна-Гордона, зв'язаної з хвильовою функцією в імпульсному представленні співвідношенням

$$\Psi^+(\vec{r}, t) = \int \sqrt{\frac{m_0 c^2}{\varepsilon(p)}} a^+(\vec{p}, t) e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad (4)$$

з якого випливає, що

$$\sqrt{\frac{m_0 c^2}{\varepsilon(p)}} a^+(\vec{p}, t) = \int \Psi^+(\vec{r}, t) e^{-\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \frac{d^3 r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (5)$$

Використовуючи останнє співвідношення, перетворимо вираз (3) таким чином:

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 m_0 c^2} \int (p^2 c^2 + m_0^2 c^4) \Psi^{+*}(\vec{r}, t) e^{-\frac{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}} \Psi^+(\vec{r}', t) d^3 p d^3 r' d^3 r = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3 m_0 c^2} \int \Psi^{+*}(\vec{r}, t) (-\hbar^2 c^2 \Delta + m_0^2 c^4) e^{-\frac{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}} \Psi^+(\vec{r}', t) d^3 p d^3 r' d^3 r. \end{aligned} \quad (6)$$

Варто звернути увагу на порядок розташування множників в останньому інтегралі, що зручний для його подальших перетворень. Після виконання інтегрування по імпульсах в останньому виразі за допомогою формули

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{\frac{i\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')}{\hbar}} d^3p = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

елементарно виконується інтегрування і по r' , так що для середнього значення енергії частинки одержуємо наступний вираз:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{m_0 c^2} \int \Psi^{+*}(\vec{r}, t) (-\hbar^2 c^2 + m_0^2 c^4) \Psi^+(\vec{r}, t) d^3r. \quad (7)$$

Після використання нормування хвильової функції (2) отримаємо:

$$\int |a^+(\vec{p}, t)|^2 d^3p = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \int \left\{ \Psi^{+*} \frac{\partial \Psi^+}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{+*}}{\partial t} \Psi^+ \right\} d^3r = 1. \quad (8)$$

Можна одержати і трохи інший вираз для середнього значення енергії частинки, якщо скористатися співвідношенням, що випливає з формул (1) і (5)

$$-i \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\hbar} a^+(\vec{p}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{a^+(\vec{p}, t)}{\sqrt{\varepsilon}} = \frac{1}{\sqrt{m_0 c^2}} \int e^{\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^+ \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \quad (9)$$

За допомогою виразу (9) формулу (3) легко записати в координатному представленні в такий спосіб:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \int \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi^+(\vec{r}, t) \right)^* \frac{\partial \Psi^+}{\partial t}(\vec{r}, t) d^3r. \quad (11)$$

Відповідно до отриманих виразів (7) і (10) середню енергію безспінової частинки можна записати також у вигляді

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \int \left\{ \frac{\partial \Psi^{+*}}{c \partial t} \frac{\partial \Psi^+}{c \partial t} + (\nabla \Psi^+)^* (\nabla \Psi^+) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} |\Psi^+|^2 \right\} d^3r. \quad (10)$$

Задача 3. Знайти розв'язок рівняння Дірака, що описує вільну частинку, яка має визначені імпульс та енергію. Для конкретизації спінового стану частинки варто скористатися комутативністю оператора $\hat{\Lambda} = \hat{p}\Sigma$ з операторами $\hat{p}$ і $\hat{H}$.

Розв'язування

Розв'язування рівняння Дірака для вільної частинки, що відповідають визначеним значенням енергії ε та імпульсу $\vec{p}$, мають вигляд

$$\Psi_{\vec{p}, \vec{r}} = u(\vec{p}, \varepsilon) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t) \right\}, \quad (1)$$

де біспіно́р $u(\vec{p}, \varepsilon)$ задовольняє стаціонарному рівнянню Дірака,

$$(c\alpha\vec{p} + m_0c^2\beta)u(\vec{p}, \varepsilon) = \varepsilon u(\vec{p}, \varepsilon), \quad (2)$$

або, для двокомпонентних спіно́рів,

$$\begin{aligned} c\sigma\vec{p}\chi + m_0c^2\varphi &= \varepsilon\varphi, \\ c\sigma\vec{p}\varphi - m_0c^2\chi &= \varepsilon\chi, \end{aligned} \quad u(\vec{p}, \varepsilon) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Друге з рівнянь (3) зводиться до такого:

$$\chi = \frac{c}{\varepsilon + m_0c^2} \sigma\vec{p}\varphi. \quad (4)$$

Після підстановки цього виразу в перше з рівнянь (3) одержуємо (з урахуванням співвідношення $(\sigma p)^2 = p^2$):

$$\frac{c^2 p^2}{\varepsilon + m_0c^2} \varphi = (\varepsilon - m_0c^2) \varphi.$$

Звідси випливає, що $\varepsilon = \pm \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$. При цьому спіно́р φ залишається невизначеним і може бути вибраний довільними двома незалежними способами (для кожного з двох різних за знаком значень ε).

Таким чином, при фіксованому імпульсі $\vec{p}$ існує чотири незалежних розв'язки рівняння Дірака (1), для яких біспіно́ри $u(\vec{p}, \varepsilon)$ є рівними між собою

$$u(\vec{p}, \varepsilon = E) = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \frac{c\sigma\vec{p}}{E + m_0c^2} \varphi_1 \end{pmatrix}, \quad u(\vec{p}, \varepsilon = -E) = \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ \frac{c\sigma\vec{p}}{-E + m_0c^2} \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

де $E = +\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \geq m_0c^2$.

Існування розв'язку рівняння Дірака, що відповідають формально негативній енергії частинки, асоціюється зі станами античастинки. Саме у зв'язку з "теорією дірок", сформульованої Діраком для наочної інтерпретації станів з негативною енергією, і виникла концепція античастинки.

Для конкретизації вигляду спіно́ра φ , а з ним і хвильової функції (1), (5), скористаємося комутативністю ермітового оператора $\hat{\Lambda} = \Sigma\hat{\vec{p}}$ з операторами $\hat{\vec{p}}$

і $\hat{H}$ та введемо повну систему функцій $\Psi_{\delta\vec{a}\vec{e}}$. При цьому з рівняння $\hat{\Lambda}\Psi_{\delta\vec{a}\vec{e}} = \Lambda\Psi_{\delta\vec{a}\vec{e}}$, де

$$\Psi_{\delta\vec{a}\vec{e}} = u(\vec{p}, \varepsilon, \Lambda) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)\right\}, \quad u(\vec{p}, \varepsilon, \Lambda) = \begin{pmatrix} \varphi_{\Lambda} \\ \frac{c\sigma\vec{p}}{\varepsilon + m_0c^2}\varphi_{\Lambda} \end{pmatrix},$$

впливає, що

$$(\sigma\vec{p})\varphi_{\Lambda} = \Lambda\varphi_{\Lambda}, \text{ або } \left(\frac{\sigma}{2}\vec{n}\right)\varphi_{\Lambda} = \lambda\varphi_{\Lambda}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}, \quad \Lambda = 2\lambda|\vec{p}|. \quad (6)$$

Розв'язки рівняння (6) отримані в нерелятивістській теорії спіна.

Задачі для самостійного опрацювання

1. а) Який вигляд приймає рівняння Кляйна-Гордона для зарядженої безспінової частинки в зовнішньому електромагнітному полі при перетворенні хвильової функції $\Psi \rightarrow \Psi_c(\vec{r}, t) = \hat{C}\Psi(\vec{r}, t) \equiv \Psi^*(\vec{r}, t)$?

б) Яке перетворення електромагнітного поля варто здійснити одночасно з зазначеним перетворенням функції $\Psi(\vec{r}, t)$, щоб одержане рівняння мало такий же вигляд, як і вихідне?

в) На підставі отриманих результатів дати інтерпретацію перетворення $\hat{C}$ як перетворення зарядового спряження, що здійснює перехід від частинки до античастинки.

2. Показати, що зовнішнє скалярне (стосовно перетворення Лоренца) поле однаково діє на безспінову частинку і відповідну їй античастинку. Порівняти з випадком частинки в зовнішньому електромагнітному полі.

Зауваження. Рівняння, що описує безспінову частинку в зовнішньому скалярному полі $U(\vec{r}, t)$, має вигляд $\{c^2\hat{p}^2 + m_0^2c^4 + 2m_0c^2U\}\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi$. Не слід плутати скалярне поле з електростатичним (останнє представляє тимчасовий компонент 4-вектора). У нерелятивістському наближенні межі $U(\vec{r}, t)$ має зміст звичайної потенціальної енергії.

3. Показати, що внутрішні парності безспінової частинки і відповідної їй античастинки – однакові.
4. Ґрунтуючись на збереженні величини Q (див. задачу 1), обговорити питання про ортогональність і нормування функцій $\Psi_{p,E}(\vec{r},t)$, що є розв'язком рівняння Кляйна-Гордона, і відповідають конкретним значенням енергії (обох знаків) та імпульсу.
5. Показати, що для безспінової частинки в релятивістському випадку можна зберегти звичайну інтерпретацію хвильової функції в імпульсному представленні як амплітуди імовірності значень імпульсу (на відміну від координатного представлення). Який зв'язок хвильових функцій частинки й античастинки в імпульсному представленні з розв'язком $\Psi^\pm(\vec{r},t)$ рівняння Кляйна-Гордона? Обговорити питання про власні функції оператора координат частинки. Порівняти з нерелятивістським випадком.
6. Одержати вираз для середнього значення імпульсу вільної безспінової частинки у довільному стані, який описується розв'язком $\Psi^+(\vec{r},t)$ рівняння Кляйна-Гордона.
7. Одержати вираз для середнього значення моменту імпульсу вільної безспінової частинки в будь-якому стані, що описується розв'язком $\Psi^+(\vec{r},t)$ рівняння Кляйна-Гордона.
8. Знайти в релятивістському випадку енергетичний спектр зарядженої безспінової частинки, яка знаходиться в однорідному магнітному полі.
9. Знайти енергетичний спектр s-станів безспінової частинки в зовнішньому скалярному полі вигляду

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

Який енергетичний спектр античастинки в такому полі? Обговорити труднощі в інтерпретації енергетичного спектра, що виникають при значному поглибленні ями.

10. Знайти енергетичні рівні дискретного спектра зарядженої безспінової частинки (заряд $-e$) у кулонівському полі ядра з зарядом Ze (ядро вважати

точковим і нескінченно важким). У випадку $Z\alpha \ll 1$ ($\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$) порівняти отриманий результат з відповідним виразом нерелятивістської теорії. Звернути увагу на труднощі, що виникають в інтерпретації енергетичного спектра при досить великих значеннях заряду ядра, і пояснити їхню причину.

11. Показати, що для станів вільної частинки рівняння Кляйна-Гордона можна записати у виді рівняння Шредінгера $i\hbar\partial\Psi/\partial t = \hat{H}_{rel}\Psi$. Знайти відповідний гамільтоніан і обговорити його нерелятивістські межі. Який зв'язок шредінгеровської хвильової функції Ψ з розв'язком Ψ^+ рівнянь Кляйна-Гордона?

12. Виходячи зі стаціонарного рівняння Кляйна-Гордона для зарядженої спінової частинки, що знаходиться в постійному електромагнітному полі:

а) одержати в нерелятивістському наближенні рівняння Шредінгера;

б) знайти перші дві ($\propto 1/c^2$ і $\propto 1/c^4$) релятивістські поправки до гамільтоніану частинки.

Показати, що поправка $\propto 1/c^4$ включає доданки, що відрізняються від розкладу гамільтоніану

$$\hat{H}_{rel} = \sqrt{c^2 \left(\hat{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + m_0^2 c^4} + e\varphi - m_0 c^2.$$

13. Показати, що в досить сильному електростатичному полі заряджена безспінова частинка притягується (у квантово-механічному розумінні) незалежно від знаку її заряду.

14. З'ясувати, які з нижче зазначених операторів комутують з гамільтоніаном вільної релятивістської частинки зі спіном $s = 1/2$ (і тому є інтегралами руху):

$$1) \hat{p} = -i\hbar\nabla; \quad 2) \hat{l} = \frac{1}{\hbar}[\vec{r}, \hat{p}]; \quad 3) \hat{l}^2;$$

$$4) \hat{s} = \frac{1}{2}\Sigma; \quad 5) \hat{s}^2; \quad 6) \hat{j} = \hat{l} + \hat{s};$$

$$7) \hat{j}^2; \quad 8) \hat{\Lambda} = \hat{p}\Sigma; \quad 9) \hat{I}[\hat{I}\Psi(r) \equiv \Psi(-r)];$$

$$10) \hat{P} \equiv \beta\hat{I}; \quad 11) \gamma_s.$$

Порівняти з випадком вільної нерелятивістської частинки.

15. Знайти компоненти 4-вектора густини струму вільної діраковської частинки в стані, що характеризується визначенням значення її імпульсу. Порівняти з відповідними виразом нерелятивістської теорії.

16. Знайти середнє значення вектора спіна діраковської частинки, що має визначений імпульс і будь-який спіновий стан. Вважати для простоти, що імпульс спрямований уздовж осі OZ . Порівняти з результатом нерелятивістської теорії.

17. Розглянути унітарне перетворення біспінів, що задається унітарним оператором (матрицею)

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Який вигляд мають у новому представленні оператор спіна частинки і рівняння Дірака для двокомпонентних спінів

$$\Psi' = \hat{U}\Psi \equiv \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}?$$

Обговорити випадок безмасової частинки ($m_0 = 0$, m_0 – маса спокою частинки).

18. Вважаючи відомим спіновий стан у системі спокою частинки, знайти біспінову $u(\vec{p})$ у довільній системі координат, у якій частинка має імпульс $\vec{p}$. Використовуючи отриманий результат, знайти зв'язок середніх значень вектора спіна частинки у зазначеній системі координат.

19. Відомо (див. 17), що для частинки зі спином $s = \frac{1}{2}$, хвильова функція стану з імпульсом $\vec{p}$ і енергією $\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$ має вигляд

$$\Psi_{\vec{p}}^+ = u(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\vec{r} - \varepsilon t)/\hbar}; \quad u(p) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\sigma\vec{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}.$$

Зазначений стан є двократно виродженим (існує два незалежних способи вибору спінора φ), що зв'язано зі спіновим ступенем вільності. Розглянемо два таких незалежних стани, що відповідають вибору спінора φ у вигляді φ_{λ} , де $(\sigma\vec{n})\varphi_{\lambda} = \lambda\varphi_{\lambda}$, $\vec{n}$ – довільний одиничний вектор, $\lambda = \pm 1$. Переконатися в

ортогональності спінових станів релятивістської частинки, які відповідають різним значенням λ .

20. Використовуючи результат попередньої задачі, з'ясувати фізичний зміст вектора $\tilde{n}$ і відповідних власних значень λ . Який зміст вектора $\frac{1}{2}\varphi^* \sigma \varphi$ при нормуванні $\varphi^* \varphi = 1$?

21. Виконавши перетворення зарядового спряження, знайти явний вигляд хвильової функції Ψ_c^+ стану античастинки, що відповідає розв'язку рівняння Дірака Ψ^- з визначеним імпульсом, рівним $-\vec{p}$, і від'ємною енергією $E = -\varepsilon = -\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$ частинки. Порівняти з хвильовою функцією фізичного стану частинки (з енергією $\varepsilon \geq m_0 c^2$ та імпульсом $\vec{p}$). Як змінюється квантове число спіральності при зарядовому спряженні?

22. Показати, що для діраковської частинки з масою $m_0 = 0$ оператор (матриця) γ_s комутує з гамільтоніаном вільної частинки. Знайти власні значення зазначеного оператора і з'ясувати їхній фізичний зміст.

23. Показати, що оператори (матриці) $\hat{P}_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_s)$ є проекційними. Для діраковської частинки з масою $m_0 = 0$ ці оператори комутують з гамільтоніаном. На які стани частинки й античастинки проектує зазначені оператори $\hat{P}_{\pm}$?

24. Квантово-механічний опис фотона може бути здійснений за допомогою двох векторів $\vec{E}(\vec{r}, t)$ і $\vec{H}(\vec{r}, t)$, що задовольняють таким же рівнянням, як рівняння Максвелла класичної електродинаміки для вільного електромагнітного поля (тобто для електромагнітних хвиль у вакуумі). Показати, що ці рівняння можна представити у вигляді, аналогічному рівнянням Дірака для двокомпонентних спінових (варто врахувати, що маса фотона $m_0 = 0$, а його спін $s = 1$).

25. Знайти нерелятивістську межу (з точністю до членів порядку $\frac{1}{c}$ включно) виразу для густини заряду і струму діраковської частинки, що знаходиться в зовнішньому електромагнітному полі.

26. Гамільтоніан частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$, що знаходиться в зовнішньому електромагнітному полі, має вигляд

$$\hat{H} = c\alpha\hat{p} + m_0c^2\beta + \frac{i\chi}{2}F_{\mu\nu}\gamma_\mu\gamma_\nu$$

де χ – деякий параметр, що характеризує частинку, $F_{\mu\nu}$ – тензор електромагнітного поля. Розглянувши нерелятивістську межу (з точністю до членів порядку $\frac{1}{c}$ включно) хвильового рівняння $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi$, з'ясувати фізичний зміст параметра χ , тобто установити його зв'язок з електромагнітними характеристиками частинки. Порівняти з випадком заряджених діраковських частинок – електрона і мюона, гамільтоніан яких має вигляд

$$\hat{H} = c\alpha\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right) + m_0c^2\beta + eA_0.$$

27. Знайти енергетичний спектр зарядженої діраковської частинки в однорідному магнітному полі.

Рівняння Дірака 6

- неперервності 61

- руху Лагранжа 12

- Шредінгера 5, 6, 23, 28, 59, 88,
129, 131–133

- - для стаціонарних станів 27, 62,
63, 73, 97, 119

Співвідношення невизначеності 30,
32

Стан системи 22, 28-30, 33, 51, 60,
67, 70, 118

Спектр дискретний 43, 44, 47, 52,
53, 56

- неперервний 43, 47, 53, 58

- оператора 43, 44, 74

Спін 6, 103, 110, 113-115, 118

Середнє значення 36, 38, 39, 42,
44, 52, 57, 63, 66, 89, 111

- - координати 36

Точки повороту 95, 103,

Унітарне перетворення 73

Умова нормування 30, 53, 60, 109,
112, 119, 127

Фотон 9–11, 103

Функції ортогональні 37, 45, 46

Хвильова функція 25, 27, 29, 33–
36, 42, 51, 52, 56, 57, 59, 60, 63, 67,
71, 74, 81, 89, 95, 97–99, 120, 121,
125–127, 132, 134

Навчальне видання

Василь БОЙЧУК, Віталій ГОЛЬСЬКИЙ, Ірина ШАКЛЕІНА

ОСНОВИ КВАНТОВОЇ МЕХАНІКИ

Навчальний посібник

Частина II

**Редакційно-видавничий відділ
Дрогобицького державного педагогічного університету
імені Івана Франка**

Головний редактор

Ірина Невмержицька

Редактор

Іванна Біблій

Технічний редактор

Наталя Кізима

Коректор

Наталя Кізима

Здано до набору **12.03.2012 р.** Підписано до друку **11.04.2012 р.** Формат 60х90/16.
Папір офсетний. Гарнітура Arial. Наклад 300 прим. **Ум. друк. арк. 9,05.** Зам. 80.

Редакційно-видавничий відділ Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. (Свідectво про внесення суб'єкта видавничої справи до державного реєстру видавців, виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції ДК № 2155 від 12. 04. 2005 р.) 82100, Дрогобич, вул. І.Франка, 24, к.42, тел. 2 – 23 – 78.