

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА - Часть II.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Программа лекций.

1. Стационарная теория возмущений.
 - 1.1. Поправки к уровням энергии и волновым функциям.
 - 1.2. Теория возмущений для вырожденных уровней. Эффект Штарка.
2. Сверхтонкая структура атома водорода.
 - 2.1. Гамильтониан взаимодействия магнитных моментов протона и электрона. Расщепление основного состояния атома водорода.
 - 2.2. Эффект Зеемана для основного состояния атома водорода.

Программа лекций.

- 3. Сложение моментов импульса. Атом в магнитном поле.
- 4. Многоэлектронные системы.
 - 4.1. Атом гелия. Периодическая система элементов.
 - 4.2. Модель атома Томаса-Ферми.
 - 4.3. Магнитные свойства электронного газа.
 - 4.4. Астрофизические приложения.
- 5. Молекулярная связь.
 - 5.1. Молекулярный ион водорода.
 - 5.2. Колебательные и вращательные уровни энергии.

Программа лекций.

6. Нестационарная теория возмущений.

6.1. Скорость перехода между состояниями.

6.2. Периодические возмущения.

6.3. Внезапные возмущения. Эффект Мессбауэра.

7. Рассеяние частиц.

7.1. Борновское приближение.

7.2. Рассеяние медленных частиц.

7.3. Рассеяние тождественных частиц.

8. Излучение.

8.1. Квантование электромагнитного поля.

8.2. Гамильтониан взаимодействия заряженных частиц и излучения.

8.3. Дипольное излучение.

8.4. Фотоэффект.

Литература.

Список рекомендованной литературы.

1. Сербо В.Г., Хрипович И.Б. Квантовая механика. Новосибирск: НГУ, 2008.
2. Зелевинский В.Г. Квантовая физика. Том 1, 2. Новосибирск: НГУ, 2015.
3. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Том 8: Квантовая механика (I). М.: Мир. 1967.
4. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Том 9: Квантовая механика (II). М.: Мир. 1967.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
6. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. М.:Наука, 1981.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 1 Стационарная теория возмущений.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Стационарная теория возмущений

Немногие задачи в квантовой механике решаются точно и поэтому используют приближенные методы. Одним из основных приближенных методов является теория возмущений.

Часто можно разделить гамильтониан системы на две части

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1)$$

где для $\hat{H}_0$ мы знаем решение

$$\hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}, \quad (2)$$

а часть $\hat{V}$, называемая возмущением (например для атома водорода добавка связана с внешним электрическим или магнитным полем), является в некотором смысле малой. Для каждой конкретной задачи условие малости этой добавки будут свои.

Стационарная теория возмущений

Если величина $\hat{V}$ не зависит от времени, то мы пользуемся стационарной теорией возмущения, находя поправки к уровням энергии и волновым функциям. Уравнение Шредингера решается методом последовательных приближений.

Для удобства введем параметр λ записывая

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}, \quad (3)$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots, \quad (4)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (5)$$

Верхний индекс указывает на номер приближения.

Стационарная теория возмущений

Условие применимости теории возмущений

$$\psi_n^{(0)} \gg \psi_n^{(1)} \gg \psi_n^{(2)} \dots, \quad (6)$$

$$E_n^{(0)} \gg E_n^{(1)} \gg E_n^{(2)} \dots \quad (7)$$

Это означает, что решая уравнение Шредингера

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n &= (\hat{H}_0 + \lambda\hat{V}) \cdot (\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots) = E_n\psi_n = \\ &= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots) \cdot (\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots) \end{aligned} \quad (8)$$

методом последовательных приближений, следует приравнивать члены с одинаковыми степенями λ .

Стационарная теория возмущений

Приравнивая члены λ^1 получаем

$$\hat{H}_0\psi_n^{(1)} + \hat{V}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(0)}. \quad (9)$$

Волновые функции невозмущенной системы $\psi_n^{(0)}$ образуют полный набор, по которому можно разложить волновые функции первого приближения

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m c_m^{(1)} \psi_m^{(0)}. \quad (10)$$

Умножим уравнение (9) слева на $\psi_n^{(0)*}$, проинтегрируем по координатам и, используя ортогональность волновых функций

$$\int \psi_n^{(0)*} \psi_m^{(0)} d^3r = \delta_{mn}, \quad (11)$$

Стационарная теория возмущений

получим поправку первого порядка к энергии (использовали уравнение (2))

$$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} d^3 r \equiv V_{nn}. \quad (12)$$

Умножим уравнение (9) слева на $\psi_k^{(0)*}$, $k \neq n$, и рассматривая случай невырожденных состояний $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$, получим

$$c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad k \neq n. \quad (13)$$

Следовательно поправка первого порядка к волновой функции равна

$$\psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}. \quad (14)$$

Стационарная теория возмущений

В некоторых задачах поправка первого порядка может быть равна нулю. Тогда мы ищем поправку второго порядка, приравнявая в уравнении Шредингера (8) члены порядка λ^2

$$\hat{H}_0\psi_n^{(2)} + \hat{V}\psi_n^{(1)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)}. \quad (15)$$

Разлагаем поправку второго порядка к волновой функции по полному набору невозмущенных волновых функций

$$\psi_n^{(2)} = \sum_m c_m^{(2)} \psi_m^{(0)}. \quad (16)$$

Умножим уравнение (15) слева на $\psi_n^{(0)*}$, проинтегрируем по координатам, получая

$$E_n^{(2)} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(1)} d^3r - E_n^{(1)} \int \psi_n^{(0)*} \psi_n^{(1)} d^3r. \quad (17)$$

Стационарная теория возмущений

Последний член можно считать равным нулю. Действительно, в силу условия нормировки волновой функции в первом приближении

$$1 = \int \psi_n^* \psi_n d^3r = \int \psi_n^{(0)*} \psi_n^{(0)} d^3r + \\ + \lambda \left(\int \psi_n^{(0)*} \psi_n^{(1)} d^3r + \int \psi_n^{(1)*} \psi_n^{(0)} d^3r \right) = 1 + c_n^{(1)} + \left(c_n^{(1)} \right)^* \quad (18)$$

коэффициенты $c_n^{(1)}$ являются чисто мнимыми и не могут давать вклад в вещественное значение энергии. Используя уравнение (14), получим поправку второго порядка к энергии

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{nm} V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (19)$$

Стационарная теория возмущений

Пример. Найдем поправки к уровням энергии одномерного гармонического осциллятора, описываемого гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (20)$$

под действием возмущения

$$\hat{V} = \alpha \hat{x} \quad (21)$$

(например, на заряженную частицу осциллятора действует постоянное электрическое поле).

Обозначим собственные функции невозмущенного гамильтониана $|n\rangle$:

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle. \quad (22)$$

Стационарная теория возмущений

Вспомним из лекции 3 как действует оператор рождения $\hat{a}^\dagger$ и оператор уничтожения $\hat{a}$ на собственные функции невозмущенного гамильтониана

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (23)$$

а также как выражаются операторы импульса и координаты

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \frac{(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)}{i}, \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (24)$$

Поправка первого порядка равна нулю

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle = \alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle = 0. \quad (25)$$

Вклад в поправку второго порядка дают только члены с $m = n \pm 1$. В итоге получаем

$$E_n^{(2)} = \alpha^2 \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{n}{\hbar\omega} + \frac{n+1}{-\hbar\omega} \right) = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2}. \quad (26)$$

Стационарная теория возмущений

Независимость сдвига уровней энергии от номера состояния можно понять, если преобразовать полный гамильтониан

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + \alpha \hat{x} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(\hat{x}^2 + 2\hat{x} \frac{\alpha}{m\omega^2} + \frac{\alpha^2}{m^2\omega^4} - \frac{\alpha^2}{m^2\omega^4} \right) = \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}'^2}{2} - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2}.\end{aligned}\quad (27)$$

Поскольку коммутатор оператора импульса $\hat{p}$ и сдвинутой координаты $\hat{x}' = \hat{x} + \frac{\alpha}{m\omega^2}$ остался неизменным

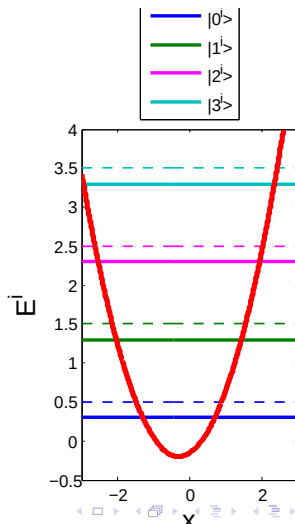
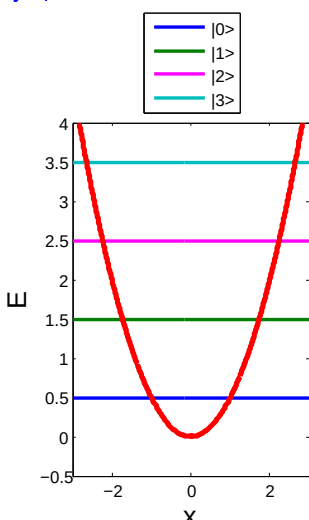
$$[\hat{x}', \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar,$$

энергии всех уровней просто сдвигаются на величину

$$-\frac{\alpha^2}{2m\omega^2}.$$

Стационарная теория возмущений

Изменение энергий уровней гармонического осциллятора под действием возмущения $V = \alpha x$. Показано также изменение полного потенциала **U**.



Стационарная теория возмущений

Теорию возмущений для вырожденных состояний (разные состояния имеют одинаковую энергию) разберем на конкретном примере. Рассмотрим как влияет внешнее однородное электрическое поле $\mathcal{E}$, оператор возмущения

$$\hat{V} = e\mathcal{E}z, \quad (28)$$

на уровне атома водорода с главным квантовым числом $n = 2$ (эффект Штарка). Четыре “невозмущенных” состояния имеют одинаковую энергию

$$\begin{aligned} &|n = 2, l = 0, m = 0\rangle, \quad |n = 2, l = 1, m = 0\rangle, \\ &|n = 2, l = 1, m = +1\rangle, \quad |n = 2, l = 1, m = -1\rangle, \end{aligned} \quad (29)$$

где n – главное квантовое число, l – квантовое число орбитального момента, а m – квантовое число проекции орбитального момента.

Оператор проекции момента импульса на ось z коммутирует с невозмущенным гамильтонианом и с оператором возмущения

$$[\hat{L}_z, \hat{H}_0] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{V}] = e\mathcal{E}[\hat{L}_z, z] = 0. \quad (30)$$

Стационарная теория возмущений

Поэтому не равны нулю только матричные элементы

$$\langle 200 | \hat{V} | 210 \rangle = \langle 210 | \hat{V} | 200 \rangle^*, \quad (31)$$

тогда как например

$$\langle 200 | \hat{V} | 211 \rangle = \langle 200 | \hat{V} \hat{L}_z | 211 \rangle = \langle 200 | \hat{L}_z \hat{V} | 211 \rangle = 0, \quad (32)$$

где использовано

$$\hat{L}_z | 211 \rangle = | 211 \rangle, \quad \langle 200 | \hat{L}_z = 0. \quad (33)$$

Обозначим для краткости состояния

$$| 200 \rangle = | 0 \rangle, \quad | 210 \rangle = | 1 \rangle, \quad (34)$$

и представим волновую функцию в виде линейной комбинации

$$| \psi \rangle = a_1 | 0 \rangle + a_2 | 1 \rangle. \quad (35)$$

Стационарная теория возмущений

Чтобы решить уравнение Шредингера для двухуровневой системы

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \cdot (a_1|0\rangle + a_2|1\rangle) = E(a_1|0\rangle + a_2|1\rangle), \quad (36)$$

умножим его слева сначала на $\langle 0|$

$$a_1(H_{00} + V_{00}) + a_2V_{01} = Ea_1, \quad (37)$$

а затем на $\langle 1|$

$$a_2(H_{11} + V_{11}) + a_1V_{10} = Ea_2. \quad (38)$$

Полученная система уравнений имеет нетривиальное решение при условии обращения в ноль определителя

$$\begin{vmatrix} H_{00} + V_{00} - E & V_{01} \\ V_{10} & H_{11} + V_{11} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (39)$$

Это уравнение называют *секулярным*.

Стационарная теория возмущений

В данном случае

$$H_{00} = H_{11} = E_0, \quad V_{00} = V_{11} = 0. \quad (40)$$

Тогда имеем два уровня энергии

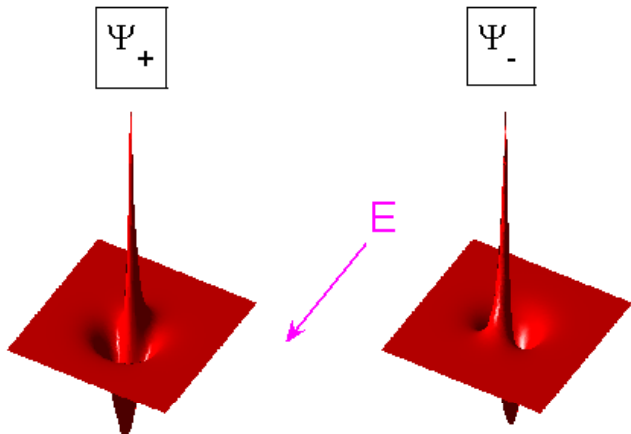
$$E = E_0 \pm |V_{01}|, \quad (41)$$

которым соответствуют волновые функции

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + \frac{V_{10}}{|V_{10}|} |1\rangle \right), \quad \psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle - \frac{V_{10}}{|V_{10}|} |1\rangle \right). \quad (42)$$

Стационарная теория возмущений

Волновые функции в плоскости xz . Следует обратить внимание на асимметрию волновых функций (и значит распределения заряда) относительно направления внешнего поля E .



Стационарная теория возмущений

Найдем матричный элемент V_{10} . Волновые функции (лекция 10) равны

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}, \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{32\pi a^3}} \frac{r \cos \theta}{a} e^{-r/2a}. \quad (43)$$

Тогда

$$V_{10} = \frac{e\mathcal{E}}{16\pi a^3} \int_{-1}^{+1} 2\pi \cos^2 \theta d \cos \theta \int_0^{+\infty} \frac{r^4}{a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/a} dr = -3e\mathcal{E}a. \quad (44)$$

Таким образом под действием электрического поля происходит расщепление уровней

$$|200\rangle, |210\rangle,$$

а уровни

$$|211\rangle, |21-1\rangle$$

остаются вырожденными.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 2 Сверхтонкая структура атома водорода.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Сверхтонкая структура атома водорода

В нерелятивистской теории при учете только кулоновского взаимодействия между протоном и электроном основное состояние атома водорода невырождено.

Однако и у электрона и у протона есть магнитные моменты, которые взаимодействуют друг с другом. Найдем как изменится энергия основного состояния с учетом этого взаимодействия.

Гамильтониан взаимодействия равен

$$\hat{H} = A \vec{\sigma}^{(e)} \vec{\sigma}^{(p)} = A(\hat{\sigma}_x^{(e)} \hat{\sigma}_x^{(p)} + \hat{\sigma}_y^{(e)} \hat{\sigma}_y^{(p)} + \hat{\sigma}_z^{(e)} \hat{\sigma}_z^{(p)}), \quad (45)$$

где σ матрицы Паули. Постоянная A – характерная энергия взаимодействия магнитных моментов электрона и протона, может быть оценена как

$$A \sim \frac{\mu_e \mu_p}{a_B^3} \sim \frac{m}{M_p} \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2} \frac{m^3 e^6}{\hbar^6} \sim \frac{m}{M_p} \alpha^2 R_y \sim 10^{-6} \text{ эВ}. \quad (46)$$

Сверхтонкая структура атома водорода

В качестве базисных состояний выберем собственные состояния $\hat{\sigma}_z$

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle, \quad (47)$$

где первая переменная вектора $|\alpha\beta\rangle$ описывает состояние электрона, а вторая – протона (соответственно, матрица $\hat{\sigma}^{(e)}$ действует на первую переменную α , тогда как $\hat{\sigma}^{(p)}$ действует на вторую переменную β). Используя соотношения (лекция 8)

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x|+\rangle &= |-\rangle, \quad \hat{\sigma}_y|+\rangle = i|-\rangle, \quad \hat{\sigma}_z|+\rangle = |+\rangle, \\ \hat{\sigma}_x|-\rangle &= |+\rangle, \quad \hat{\sigma}_y|-\rangle = -i|+\rangle, \quad \hat{\sigma}_z|-\rangle = -|-\rangle, \end{aligned} \quad (48)$$

получаем

$$\begin{aligned} \vec{\hat{\sigma}}^{(e)}\vec{\hat{\sigma}}^{(p)}|++\rangle &= |++\rangle, \quad \vec{\hat{\sigma}}^{(e)}\vec{\hat{\sigma}}^{(p)}|+-\rangle = 2| - + \rangle - | + - \rangle, \\ \vec{\hat{\sigma}}^{(e)}\vec{\hat{\sigma}}^{(p)}|-+\rangle &= 2| + - \rangle - | - + \rangle, \quad \vec{\hat{\sigma}}^{(e)}\vec{\hat{\sigma}}^{(p)}|--\rangle = |--\rangle. \end{aligned} \quad (49)$$

Сверхтонкая структура атома водорода

Чтобы решить уравнение Шредингера

$$A\vec{\sigma}^{(e)}\vec{\sigma}^{(p)}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (50)$$

разложим вектор $|\psi\rangle$ по базисным функциям

$$|\psi\rangle = C_1|++\rangle + C_2|+-\rangle + C_3|-+\rangle + C_4|--\rangle \quad (51)$$

и получим систему уравнений

$$EC_1 = AC_1 \quad (52)$$

$$EC_2 = A(-C_2 + 2C_3) \quad (53)$$

$$EC_3 = A(2C_2 - C_3) \quad (54)$$

$$EC_4 = AC_4. \quad (55)$$

Сверхтонкая структура атома водорода

Из первого и последнего уравнений системы следует, что энергии состояний $|++\rangle$, $|--\rangle$ равны $E = A$. Складывая средние уравнения, получим тоже $E = A$ и этому значению энергии соответствует соотношение $C_2 = C_3$. Вычитая средние уравнения, получим $E = -3A$ и соотношение $C_3 = -C_2$. В результате взаимодействия спинов получилась естественная группировка состояний: три состояния с одинаковой энергией

$$E = A, |\psi\rangle_1 = |++\rangle, |\psi\rangle_0 = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}}, |\psi\rangle_{-1} = |--\rangle \quad (56)$$

с проекциями момента импульса $m = +1, m = 0, m = -1$ и одно состояние с энергией

$$E = -3A, |\psi\rangle_{00} = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}} \quad (57)$$

и проекцией момента импульса $m = 0$.

Сверхтонкая структура атома водорода

Первую группу состояний можно рассматривать как составную частицу с моментом импульса $J = 1\hbar$, а оставшееся состояние как составную частицу с моментом импульса $J = 0$. Чтобы в этом убедиться рассмотрим поведение такой системы во внешнем магнитном поле, т.е. эффект Зеемана.

При включении магнитного поля B вдоль оси z гамильтониан становится равным

$$\hat{H} = A\vec{\hat{\sigma}}^{(e)}\vec{\hat{\sigma}}^{(p)} - \mu_e B \hat{\sigma}_z^{(e)} - \mu_p B \hat{\sigma}_z^{(p)} \quad (58)$$

и получается система уравнений

$$EC_1 = AC_1 - (\mu_e + \mu_p)BC_1 \quad (59)$$

$$EC_2 = A(-C_2 + 2C_3) - (\mu_e - \mu_p)BC_2 \quad (60)$$

$$EC_3 = A(2C_2 - C_3) + (\mu_e - \mu_p)BC_3 \quad (61)$$

$$EC_4 = AC_4 + (\mu_e + \mu_p)BC_4. \quad (62)$$

Сверхтонкая структура атома водорода

Введем обозначения

$$\mu \equiv -(\mu_e + \mu_p) > 0, \quad \mu' \equiv -(\mu_e - \mu_p) > 0,$$
$$\mu \approx \mu' \text{ поскольку } |\mu_e| \gg |\mu_p|. \quad (63)$$

Из первого и последнего уравнений системы получаем $E = A \pm \mu B$, из двух средних

$$E = -A \pm \sqrt{4A^2 + \mu'^2 B^2}. \quad (64)$$

Для слабого поля в линейном по полю приближении имеем

$$E \approx A, \quad C_2 \approx C_3, \quad (65)$$

$$E = -3A \quad C_3 \approx -C_2. \quad (66)$$

Сверхтонкая структура атома водорода

Таким образом для слабого поля три состояния с энергиями

$$E = A - \mu B, \text{ для } |\psi\rangle_1 = |++\rangle, \quad (67)$$

$$E \approx A, \text{ для } |\psi\rangle_0 = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (68)$$

$$E = A - \mu B, \text{ для } |\psi\rangle_{-1} = |--\rangle \quad (69)$$

и с проекциями момента импульса $m = +1, m = 0, m = -1$ образуют составную частицу с моментом импульса $J = 1\hbar$.

Сверхтонкая структура атома водорода

Состояние с энергией

$$E = -3A, \quad |\psi\rangle_{00} = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}} \quad (70)$$

и проекцией момента импульса $m = 0$ образует составную частицу с моментом импульса $J = 0$.

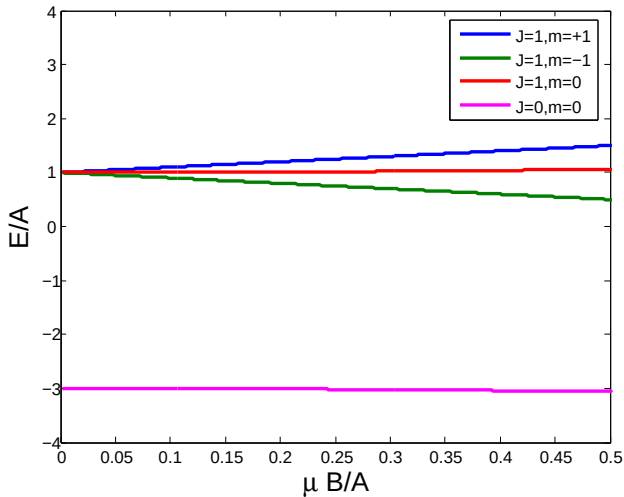
В случае сильных полей ($\mu B \gg A$) взаимодействие несущественно и мы имеем две независимые частицы с моментом импульса $J = \hbar/2$.

Энергии уровней равны

$$E_{1,2} = \pm \mu B + A, \quad E_{3,4} \approx \pm \mu' B - A. \quad (71)$$

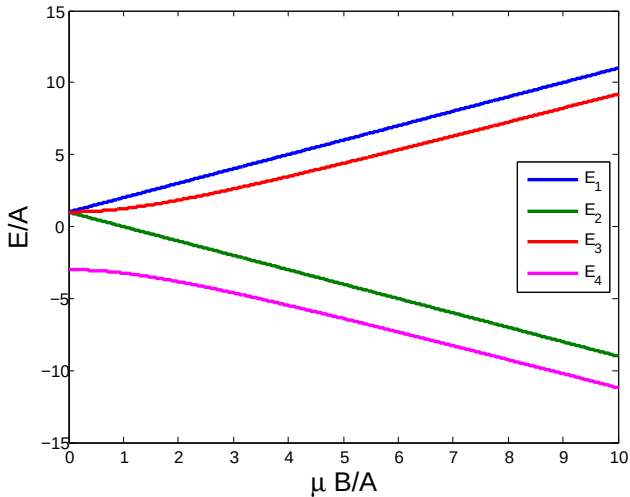
Сверхтонкая структура атома водорода

Расщепление уровней энергии в слабом магнитном поле, $\mu B \ll A$.



Сверхтонкая структура атома водорода

Расщепление уровней энергии в сильном магнитном поле, $\mu B \gg A$.



КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 3 Сложение моментов импульса

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Свойства момента импульса

Изучая сверхтонкую структуру основного состояния атома водорода, мы встретились с задачей сложение внутренних моментов импульса (спинов) электрона и протона. Аналогичная задача возникает при сложении спина электрона и его орбитального момента импульса и т.д. Рассмотрим эту задачу в общем виде. Будем обозначать оператор момента импульса буквой $\hat{J}$. Напомним некоторые общие свойства

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y. \quad (72)$$

Для повышающего $\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y$ и понижающего операторов $\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y$ имеем

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm. \quad (73)$$

Свойства момента импульса

Квадрат оператора момента импульса можно представить в виде

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z. \quad (74)$$

Поскольку квадрат оператора момента импульса коммутирует с любой компонентой оператора момента импульса

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_i] = 0, \quad (75)$$

в качестве базисных состояний можно выбрать общие собственные векторы $|j, m\rangle$

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm, \rangle, \quad \hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle. \quad (76)$$

Свойства момента импульса

Операторы $\hat{J}_{\pm}$ называются повышающим и понижающим поскольку

$$\hat{J}_z (\hat{J}_+ |j, m\rangle) = (\hat{J}_+ \hat{J}_z + \hbar \hat{J}_+) |j, m\rangle = \hbar(m+1) \hat{J}_+ |j, m\rangle, \quad (77)$$

$$\hat{J}_z (\hat{J}_- |j, m\rangle) = (\hat{J}_- \hat{J}_z - \hbar \hat{J}_-) |j, m\rangle = \hbar(m-1) \hat{J}_- |j, m\rangle. \quad (78)$$

Таким образом

$$\hat{J}_+ |j, m\rangle = C_+ |j, m+1\rangle, \quad \hat{J}_- |j, m\rangle = C_- |j, m-1\rangle. \quad (79)$$

Найдем коэффициенты C_+ , C_- , используя свойства эрмитовости

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-, \quad \langle j, m+1 | \hat{J}_+ |j, m\rangle = \langle j, m | \hat{J}_- |j, m+1\rangle^*. \quad (80)$$

Свойства момента импульса

Рассмотрим матричный элемент

$$\begin{aligned}\langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | j, m \rangle &= \sum_n \langle j, m | \hat{J}_- | j, n \rangle \cdot \langle j, n | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \\ &= \langle j, m | \hat{J}_- | j, m+1 \rangle \cdot \langle j, m+1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle = |\langle j, m+1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle|^2.\end{aligned}\quad (81)$$

С другой стороны

$$\langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | j, m \rangle = \langle j, m | \left(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \right) | j, m \rangle = \hbar^2(j-m)(j+m+1).\quad (82)$$

Выбираем для удобства матричный элемент вещественным

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} = \langle j, m | \hat{J}_- | j, m+1 \rangle.\quad (83)$$

Свойства момента импульса

Из этих выражений получим матричные элементы для операторов $\hat{J}_x, \hat{J}_y$.

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_x + i\hat{J}_y | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} = \langle j, m | \hat{J}_x - i\hat{J}_y | j, m+1 \rangle. \quad (84)$$

Значит матричный элемент

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_x | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_x | j, m+1 \rangle \quad (85)$$

является вещественным числом, а матричный элемент

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_y | j, m \rangle = -\langle j, m | \hat{J}_y | j, m+1 \rangle \quad (86)$$

является чисто мнимым числом. Имеем

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_x | j, m \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \quad (87)$$

$$\langle j, m+1 | \hat{J}_y | j, m \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)}. \quad (88)$$

Свойства момента импульса

Пример: получим матричное представление для операторов момента импульса для $j = 1/2, m = \pm 1/2$. Единственный отличный от нуля матричный элемент

$$\langle 1/2, 1/2 | \hat{J}_+ | 1/2, -1/2 \rangle = \hbar. \quad (89)$$

Значит

$$\hat{J}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{J}_- = \hat{J}_+^\dagger = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (90)$$

Откуда

$$\hat{J}_x = \frac{\hat{J}_+ + \hat{J}_-}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{J}_y = \frac{\hat{J}_+ - \hat{J}_-}{2i} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (91)$$

Поскольку $\hat{J}_z |1/2, \pm 1/2\rangle = \pm \hbar/2 |1/2, \pm 1/2\rangle$

$$\hat{J}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (92)$$

что согласуется с определением матриц Паули.

Свойства момента импульса

Аналогично получается матричное представление для операторов момента импульса для $j = 1, m = +1, 0, -1$. Отличны от нуля матричные элементы

$$\langle 1, 0 | \hat{J}_+ | 1, -1 \rangle = \sqrt{2}\hbar, \quad \langle 1, +1 | \hat{J}_+ | 1, 0 \rangle = \sqrt{2}\hbar, \quad (93)$$

Откуда

$$\hat{J}_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_+^\dagger = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (94)$$

Следовательно

$$\hat{J}_x = \frac{\hat{J}_+ + \hat{J}_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{\hat{J}_+ - \hat{J}_-}{2i} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (95)$$

Свойства момента импульса

Оператор $\hat{J}_z$ диагонален

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (96)$$

В качестве упражнения можно проверить выполнение коммутационных соотношений для матричных представлений J_x, J_y, J_z .

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y. \quad (97)$$

Сложение моментов импульса

Теперь рассмотрим сложение моментов импульса двух частиц.
Состояния двух частиц можно описывать либо с помощью величин относящихся к каждой частице

$$\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}; \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}; [\hat{J}_1, \hat{J}_2] = 0, \quad (98)$$

либо полным моментом импульса и его проекции на ось z

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2; \hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}, \quad (99)$$

поскольку

$$[\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}, \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2] = 0. \quad (100)$$

Действительно

$$[\hat{J}_{1z}, \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2] = [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1x}] \hat{J}_{2x} + [\hat{J}_{1z}, \hat{J}_{1y}] \hat{J}_{2y} = i\hbar \hat{J}_{1y} \hat{J}_{2x} - i\hbar \hat{J}_{1x} \hat{J}_{2y}, \quad (101)$$

$$[\hat{J}_{2z}, \hat{J}_1 \cdot \hat{J}_2] = \hat{J}_{1x} [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{2x}] + \hat{J}_{1y} [\hat{J}_{2z}, \hat{J}_{2y}] = i\hbar \hat{J}_{1x} \hat{J}_{2y} - i\hbar \hat{J}_{1y} \hat{J}_{2x}. \quad (102)$$

Сложение моментов импульса

Сначала рассмотрим простой пример сложения моментов импульса двух частиц с $j_{1,2} = 1/2$. Максимально возможное значение проекции на ось z есть $M_{max} = 1/2 + 1/2 = 1$ и соответствует моменту импульса $J = 1$ с вектором состояния

$$|J = 1, M = 1\rangle = |j_1 = \frac{1}{2}, m_1 = \frac{1}{2}\rangle \cdot |j_2 = \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2}\rangle \equiv |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \cdot |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle. \quad (103)$$

Чтобы получить вектор состояния $|J = 1, M = 0\rangle$ подействуем понижающим оператором

$$\hat{J}_- |1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle. \quad (104)$$

С другой стороны

$$\hat{J}_- |1, 1\rangle = (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \cdot |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \hbar |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \cdot |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \hbar |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \cdot |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle. \quad (105)$$

Сложение моментов импульса

Таким образом получаем

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right). \quad (106)$$

Аналогично

$$\hat{J}_- |1, 0\rangle = \hbar \sqrt{2} |1, -1\rangle, \quad (107)$$

$$\begin{aligned} \hat{J}_- |1, 0\rangle &= (\hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \hbar \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) = \\ &= \frac{2}{\sqrt{2}} \hbar \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (108)$$

Получаем

$$|1, -1\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (109)$$

Сложение моментов импульса

Из четырех исходных состояний мы получили три. Оставшееся одно состояние соответствует полному моменту импульса $J = 0$ с проекцией $M = 0$. Состояние $|0, 0\rangle$ можно представить в виде

$$|0, 0\rangle = C_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + C_2 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad (110)$$

а коэффициенты $C_{1,2}$ находятся из условия ортогональности

$$\langle 1, 0 | 0, 0 \rangle = 0, \quad \rightarrow \quad C_2 = -C_1, \quad (111)$$

Значит

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right). \quad (112)$$

Сложение моментов импульса

В общем случае сложения моментов импульсов j_1 и j_2 получаются состояния с полным моментом импульса от $J_{max} = j_1 + j_2$ до $J_{min} = |j_1 - j_2|$, что можно наглядно увидеть из векторной модели сложения моментов импульса. Баланс полного числа состояний

$$\sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (2J + 1) = (2j_1 + 1) \cdot (2j_2 + 1). \quad (113)$$

Атом в магнитном поле.

В центральном поле сохраняются полный орбитальный момент импульса $\hat{\mathbf{L}}$ и полный спин $\hat{\mathbf{S}}$. Учет релятивистских эффектов приводит к тому, что сохраняется только полный момент импульса $\hat{\mathbf{J}}$. Релятивистские эффекты малы и приводят к небольшому расщеплению уровней с разными J .

Одним из релятивистских эффектов является спин-орбитальное взаимодействие. Оценим качественно этот эффект. В системе покоя электрона, движущегося в кулоновском поле ядра $\mathcal{E}$, возникает магнитное поле

$$B \sim \frac{v}{c} \mathcal{E} \sim \sqrt{\frac{e^2}{am}} \frac{e}{ca^2} \sim \frac{e^2}{\hbar c} \frac{e}{a^2}, \quad (114)$$

где $a = \hbar^2/(me^2)$ – боровский радиус.

Атом в магнитном поле.

Тогда поправка к энергии, возникающая от взаимодействия с этим магнитным полем B магнитного момента электрона $\mu_e = e\hbar/(2mc)$, равна

$$\delta\varepsilon \sim \frac{e\hbar}{mc} B \sim \frac{e\hbar}{mc} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{em^2e^4}{\hbar^4} \sim \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{me^4}{\hbar^2}. \quad (115)$$

Таким образом релятивистские поправки составляют величину

$$\alpha^2 \equiv \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \sim 10^{-4} \quad (116)$$

от характерного значения энергии атомных уровней. Происходит небольшое (тонкое) расщепление уровней энергии, поэтому величину α называют постоянной тонкой структуры.

Атом в магнитном поле.

Гамильтониан системы заряженных частиц в магнитном поле $\mathbf{B}_0$ принимает вид

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} - g_s \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}_0, \quad (117)$$

где

$$g_s = \frac{e}{mc}. \quad (118)$$

Удобно направить внешнее магнитное поле по оси z и выбрать векторный потенциал в виде

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{B}_0 \times \mathbf{r}]. \quad (119)$$

Оператор импульса коммутирует с векторным потенциалом, например

$$\hat{p}_x A_x - A_x \hat{p}_x = -\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} y B_0 - y B_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) = 0. \quad (120)$$

Атом в магнитном поле.

Тогда, используя соотношение

$$\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}[\mathbf{B}_0 \times \mathbf{r}] \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \cdot [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \frac{1}{2}\mathbf{B}_0 \cdot \hat{\mathbf{L}}, \quad (121)$$

получаем

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}})^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(2\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{L}}) \cdot \mathbf{B}_0 + \frac{e^2}{8mc^2}[\mathbf{B}_0 \times \mathbf{r}]^2. \quad (122)$$

Для слабых магнитных полей последним слагаемым можно пренебречь. Если на атомном уровне располагается несколько электронов, то под $\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}$ следует понимать полные орбитальный и спиновой моменты импульса.

Атом в магнитном поле.

Второй член в гамильтониане можно рассматривать как энергию взаимодействия полного магнитного момента атома

$$\mu_a = \frac{e}{2mc}(2\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{L}}) = \frac{e}{2mc}(\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{J}}) \quad (123)$$

с внешним магнитным полем $\mathbf{B}_0$. Невозмущенные состояния атома описываются квантовыми числами квадрата и проекции полного момента импульса J, M , квадратами орбитального и спинового момента импульса L, S . Поправки к уровням энергии можно рассчитать в первом порядке теории возмущений

$$\delta\varepsilon = -\frac{e}{2mc}\langle J, M, L, S | (\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{J}}) | J, M, L, S \rangle \cdot \mathbf{B}_0 = -\frac{e}{2mc}(\bar{S}_z + M)B_0. \quad (124)$$

Атом в магнитном поле.

Среднее значение векторного оператора спина $\bar{\mathbf{S}}$ должно быть направлено вдоль сохраняющейся векторной величины полного момента импульса. Опуская знак усреднения по собственным состояниям квадрата и проекциям $\hat{\mathbf{J}}$, запишем

$$\hat{\mathbf{S}} = C\hat{\mathbf{J}}, \quad (125)$$

откуда получим

$$\overline{\mathbf{S}_z} = CJ_z. \quad (126)$$

Чтобы найти константу C умножим предыдущее уравнение скалярно на $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}} = C\hat{\mathbf{J}}^2. \quad (127)$$

Тогда

$$C = \frac{\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{\hat{\mathbf{J}}^2} = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - (\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}})^2}{2\hat{\mathbf{J}}^2} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (128)$$

Атом в магнитном поле.

В итоге получаем изменение уровней энергии в слабом магнитном поле B_0

$$\delta\varepsilon = -\frac{e\hbar}{2m_e c} g B_0 m, \quad m = j, j-1, \dots, -j. \quad (129)$$

Множитель

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (130)$$

известен как фактор Ланде. Таким образом уровень расщепляется на $2j+1$ равноотстоящих компоненты.

Атом в магнитном поле.

В качестве примера рассмотрим эффект Зеемана в слабом магнитном поле для излучения атома натрия. В основном состоянии атома натрия внешний электрон находится в состоянии $3s$ атомное состояние $^2S_{1/2}$. Излучение наблюдается при переходе в основное состояние либо из возбужденного состояния $^2P_{1/2} - D_1$ линия, либо из состояния $^2P_{3/2} - D_2$ линия. Факторы Ланде для этих состояний равны

$$g(^2S_{1/2}) = 1 + \frac{1/2(1/2 + 1) + 1/2(1/2 + 1) - 0}{(1/2 + 1)} = 2, \quad (131)$$

$$g(^2P_{1/2}) = 1 + \frac{1/2(1/2 + 1) + 1/2(1/2 + 1) - 1(1 + 1)}{(1/2 + 1)} = \frac{2}{3}, \quad (132)$$

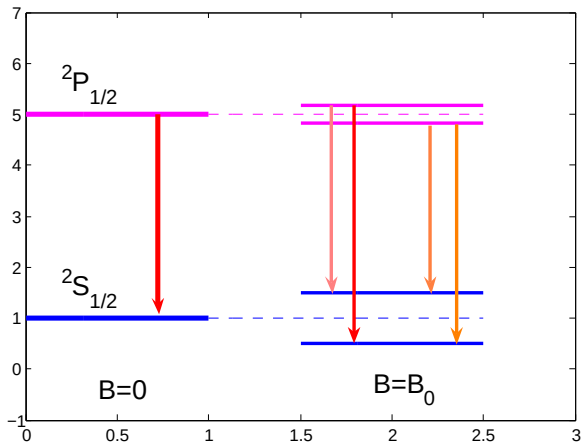
$$g(^2P_{3/2}) = 1 + \frac{3/2(3/2 + 1) + 1/2(1/2 + 1) - 1(1 + 1)}{(1/2 + 1)} = \frac{4}{3}. \quad (133)$$

Атом в магнитном поле.

Каждый из уровней $^2S_{1/2}, ^2P_{1/2}$ расщепляется в магнитном поле на два с проекциями $j_z = \pm 1/2$. Правила отбора для дипольного перехода, как выведем позже, разрешают изменения проекции момента импульса $\Delta j_z = -1, 0, +1$. Поскольку факторы Ланде для этих уровней разные, расстояния между расщепленными компонентами тоже разные и D_1 -линия расщепляется на четыре компоненты.

Атом в магнитном поле.

Эффект Зеемана для D_1 линии натрия, возникающей при переходе с уровня $^2P_{1/2}$ на уровень $^2S_{1/2}$.

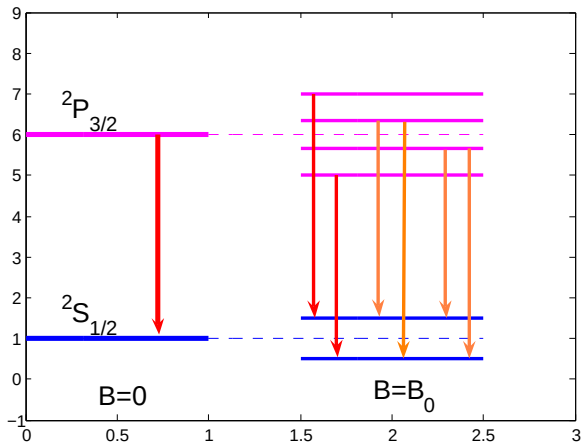


Атом в магнитном поле.

Уровень ${}^2P_{3/2}$ расщепляется в магнитном поле на четыре с проекциями $j_z = \pm 1/2, \pm 3/2$. Поскольку факторы Ланде для уровней ${}^2S_{1/2}, {}^2P_{3/2}$ тоже разные, D_2 -линия расщепляется на шесть компонент.

Атом в магнитном поле.

Эффект Зеемана для D_2 линии натрия, возникающей при переходе с уровня $^2P_{3/2}$ на уровень $^2S_{1/2}$.



Атом в магнитном поле.

Эффект Зеемана для подобных случаев называется аномальным. В некоторых случаях, когда например для основного и возбужденного состояний $S = 0$, факторы Ланде равны единице и правила отбора $\Delta j_z = -1, 0, +1$ приводят к расщеплению линии излучения на три компоненты. Тогда говорят о нормальном эффекте Зеемана, поскольку он может быть объяснен и классической физикой.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 4 Многоэлектронные атомы.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Атом гелия

Важный принцип квантовой механики, не имеющий аналога в классической механике, заключается в абсолютной тождественности (неразличимости) частиц. Все известные частицы принадлежат двум классам: фермионам и бозонам. Электроны, протоны, нейтроны имеют спин $1/2$ и относятся к классу фермионов: полная волновая функция (с учетом спина) системы из нескольких фермионов должна быть антисимметрична относительно перестановки любых частиц. Невозможность двум электронам находиться в одном и том же квантовом состоянии называют принципом запрета Паули.

Атом гелия

Простейшим многоэлектронным атомом является гелий, состоящий из ядра с зарядом $Ze = 2e$ и двух электронов.

Найдем энергию основного состояния атома гелия. Точное решение не известно, поэтому используем сначала теорию возмущений.

Гамильтониан в системе центра масс имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (134)$$

где индексы "1" и "2" относятся к первому и второму электронам, а r_{12} – расстояние между электронами. Последний член, описывающий кулоновское взаимодействие электронов, будем рассматривать как возмущение.

Атом гелия

Наименьшую энергию атом гелия будет иметь, если поместить два электрона на основное состояние в кулоновском поле заряда $Ze = 2e$

$$\Psi_0(r_1, r_2) = \psi_0(r_1) \cdot \psi_0(r_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)}, \quad (135)$$

где $\alpha = Z/a$ (a – боровский радиус).

Эта функция симметрична относительно перестановки координат электронов, значит спиновая волновая функция должна быть антисимметрична относительно перестановки, т.е. иметь вид

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \cdot \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \quad (136)$$

с полным спином системы из двух электронов $S = 0$.

Атом гелия

Энергия основного состояния в нулевом приближении

$$E_0 = -2 \cdot \frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2}. \quad (137)$$

Поправка первого порядка к энергии основного состояния равна

$$\begin{aligned} \delta E_1 &= \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \Psi_0^*(r_1, r_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_0(r_1, r_2) = \\ &= \int d^3 r_1 |\psi_0(r_1)|^2 \int d^3 r_2 |\psi_0(r_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \end{aligned} \quad (138)$$

Эту величину можно рассматривать как потенциальную энергию электростатического взаимодействия двух сферически-симметричных распределений заряда с плотностями $\rho_{1,2} = |\psi_0(r_{1,2})|^2$.

Атом гелия

С учетом симметрии относительно перестановки электронов, имеем

$$\delta E_1 = 2 \frac{e^2 \alpha^6}{\pi^2} \int_0^\infty 4\pi r_2^2 e^{-2\alpha r_2} dr_2 \frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} 4\pi r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1. \quad (139)$$

Вычислив интегралы, получим

$$\delta E_1 = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a}. \quad (140)$$

С учетом этой поправки энергия основного уровня атома гелия становится равной $E_0^{pert} \approx -75$ эВ. Экспериментальное значение $E_0^{exp} \approx -79$ эВ.

Атом гелия

Согласие с экспериментом можно улучшить, используя вариационный подход. В качестве пробной волновой функции можно выбрать

$$\Psi_0(r_1, r_2) = \psi_0(r_1) \cdot \psi_0(r_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)}, \quad (141)$$

где теперь величина α является вариационным параметром, подбираемым из условия минимума среднего значения гамильтониана

$$\begin{aligned} \bar{E} = & 2 \int_0^\infty 4\pi r^2 \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r - \frac{Ze^2}{r} \right) e^{-\alpha r} dr + \\ & + 2 \frac{e^2 \alpha^6}{\pi^2} \int_0^\infty 4\pi r_2^2 e^{-2\alpha r_2} dr_2 \frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} 4\pi r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1. \end{aligned} \quad (142)$$

Атом гелия

Вычисление интегралов дает

$$I_1 = 2 \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r \right) e^{-\alpha r} dr = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m}, \quad (143)$$

$$I_2 = 2 \int_0^{\infty} 4\pi r^2 \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha r} \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) e^{-\alpha r} dr = -e^2 Z \alpha. \quad (144)$$

Последний интеграл уже вычислили выше

$$I_3 = \frac{5e^2 \alpha}{8}. \quad (145)$$

Атом гелия

Минимизируя среднюю энергию

$$\bar{E} = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{m} - e^2 Z \alpha + \frac{5e^2 \alpha}{8} \quad (146)$$

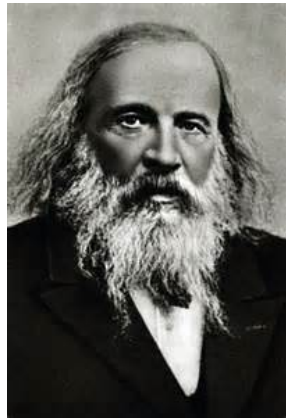
по параметру α , получаем

$$\alpha_0 = \frac{Z - 5/16}{a}, \quad \bar{E}_{min} = -\frac{e^2}{a} \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2. \quad (147)$$

Уменьшение величины α_0 по сравнению с величиной Z/a можно рассматривать как эффект экранирования поля ядра электронами. Энергия основного состояния получается равной $E_0^{var} = -77.5$ эВ, что лучше согласуется с экспериментом.

Периодическая система элементов Менделеева

Квантовая механика объясняет периодическое повторение свойств химических элементов, рассматривая последовательность заполнения уровней энергии электронами в кулоновском поле ядра с учетом кулоновского отталкивания электронов и принципа запрета Паули.



Д. Менделеев

Периодическая система элементов Менделеева

Атом водорода состоит из ядра с зарядом $Z = 1$ и одного электрона, который помещается в состояние с квантовыми числами $(n = 1, l = 0) \equiv 1s$. Для атома гелия $Z = 2$ и два электрона с разными состояниями спина (например у одного спин вверх, у другого спин вниз) помещаются в состояние $1s$. Энергия связи любого из электронов в атоме гелия больше, чем в атоме водорода за счет большего заряда ядра.

Периодическая система элементов Менделеева

Атом лития имеет ядро с зарядом $Z = 3$ и соответственно три электрона. Два из них находятся в состоянии $1s$, а третий в силу принципа запрета Паули должен заполнять состояние $2s$. Этот электрон имеет заметно меньшую энергию связи, чем у гелия, поскольку два электрона в состоянии $1s$ экранируют заряд ядра. Далее при увеличении заряда ядра у следующих элементов сначала еще один электрон заполняет состояние $2s$, а затем следующие электроны заполняют состояние $2p$, имеющее чуть более высокую энергию за счет кулоновского отталкивания электронов. В состояние $2p$ можно поместить шесть электронов $(2s + 1) \cdot (2l + 1) = 2 \cdot 3 = 6$. Энергия связи при заполнении группы $2s, 2p$ в целом растет, и максимальна у неона $Z = 10$.

Периодическая система элементов Менделеева

Натрий имеет ядро с $Z = 11$ и одиннадцатый электрон в силу принципа Паули должен заполнять состояние $3s$. Так же как у лития, этот электрон имеет заметно меньшую энергию связи за счет экранирования заряда ядра другими электронами в состояниях $1s, 2s, 2p$. Таким образом в целом происходит периодическое повторение свойств элементов. Наблюдаемое нарушение периодичности при дальнейшем увеличении заряда ядра объясняется более тонкими эффектами.

Модель атома Томаса-Ферми

Многоэлектронные атомы можно описать другой моделью, предложенной Э. Ферми и Л. Томасом. Мы рассмотрим эту модель качественно, на уровне оценок (с точностью до численных множителей).



Э. Ферми

Модель атома Томаса-Ферми

Представим грубо атом как ящик размером $R \times R \times R$. Уровни энергии в одномерном ящике найдены в лекции 2

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{R^2}. \quad (148)$$

Число состояний

$$n = \frac{R\sqrt{2m\varepsilon}}{\pi\hbar} = \frac{Rp}{\pi\hbar}, \quad (149)$$

где $p = \sqrt{2m\varepsilon} > 0$ есть модуль импульса частицы. В трехмерном случае число состояний с импульсом $p < p_0$ равно

$$N_{p < p_0} = \frac{R^3}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_0} 4\pi p^2 dp = \frac{R^3 p_0^3}{(6\pi^2 \hbar^3)}, \quad (150)$$

Здесь использованы сферические координаты.

Модель атома Томаса-Ферми

На каждый из этих уровней можно поместить два электрона (у одного спин вверх, у другого спин вниз). В атоме с зарядом ядра Z имеется Z электронов и они заполняют все уровни вплоть до значения импульса, называемого импульсом Ферми

$$p_0 = \frac{\hbar}{R} (3\pi^2 Z)^{1/3} \sim \frac{\hbar Z^{1/3}}{R}. \quad (151)$$

Кинетическая энергия всех электронов по порядку величины равна

$$T \sim Z \frac{p_0^2}{m} \sim \frac{\hbar^2 Z^{5/3}}{m R^2}. \quad (152)$$

Потенциальная энергия всех электронов в поле ядра по порядку величины равна

$$U \sim -\frac{Z^2 e^2}{R}. \quad (153)$$

Модель атома Томаса-Ферми

Рассматриваем размер атома R как вариационный параметр, минимизируем полную энергию атома

$$E = T + U \sim \frac{\hbar^2 Z^{5/3}}{mR^2} - \frac{Z^2 e^2}{R}. \quad (154)$$

$$\frac{dE}{dR} \sim -\frac{\hbar^2 Z^{5/3}}{mR^3} + \frac{Z^2 e^2}{R^2} = 0 \quad \rightarrow \quad R_0 \sim \frac{\hbar^2}{me^2 Z^{1/3}} = \frac{a}{Z^{1/3}}, \quad (155)$$

где $a = \hbar^2/me^2$ боровский радиус. Таким образом средний размер атома уменьшается с ростом заряда ядра.

Полная энергия атома равна

$$E \sim -\frac{Z^{7/3} e^2}{a} \quad (156)$$

и также уменьшается с ростом заряда ядра. Найденная зависимость от заряда ядра хорошо согласуется с экспериментом.

Модель атома Томаса-Ферми

Интересную одномерную модель атома предложил Коткин Г.Л. “Одномерный атом Томаса – Ферми”. Тонкая пластина с поверхностной плотностью заряда σ окружена электронным газом, экранирующим заряд. Найдем потенциал и плотность заряда электронов как функцию расстояния до пластины.



Г.Л. Коткин

Модель атома Томаса-Ферми

Максимальная энергия электрона

$$\frac{p_F^2}{2m} - e\phi = 0, \quad (157)$$

поскольку при удалении от пластины потенциал ϕ и плотность электронов n , связанная с импульсом Ферми p_F соотношением $n = p_F^3/(3\pi^2\hbar^3)$, стремятся к нулю. Потенциал найдем из уравнения Пуассона

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{4(2m)^{3/2}e^{5/2}}{3\pi^2\hbar^3}\phi^{3/2} \equiv a\phi^{3/2}, \quad (158)$$

с граничным условием

$$-\left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{x \rightarrow +0} = 2\pi\sigma. \quad (159)$$

Модель атома Томаса-Ферми

Заменой переменных $\phi = \alpha\psi$, $x = \beta\xi$ приводим уравнение Пуассона к более простому виду

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \psi^{3/2}, \quad (160)$$

потребовав выполнения условия $a\alpha^{1/2}\beta^2 = 1$. Граничное условие сводится к

$$-\left. \frac{d\psi}{d\xi} \right|_{\xi \rightarrow +0} = 1, \quad (161)$$

при выполнении соотношения $\alpha = 2\pi\sigma\beta$. Тогда

$$\alpha = \frac{(2\pi\sigma)^{4/5}}{a^{2/5}}, \quad \beta = \frac{(2\pi\sigma)^{-1/5}}{a^{2/5}}. \quad (162)$$

Модель атома Томаса-Ферми

Первый интеграл уравнения Пуассона получается умножением на $d\psi/d\xi$ и интегрированием:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = -\frac{2}{\sqrt{5}}\psi^{5/4}, \quad (163)$$

где константа интегрирования равна нулю т. к. $\psi \rightarrow 0$ при $\xi \rightarrow \infty$. Из другого граничного условия получаем $\psi(0) = (5/4)^{2/5}$. Еще одно интегрирование дает

$$\psi = \frac{400}{(\xi + C)^4}, \quad (164)$$

где $C = 2\sqrt{5}(4/5)^{1/10}$. Интересно отметить, что $\psi(0) \approx 1.1$. При удалении от пластины плотность электронов убывает на больших расстояниях как $n(x) \sim x^{-6}$. Вблизи пластины $n(0) \sim \sigma^{6/5}$.

Парамагнитные свойства электронного газа

Рассмотрим электронный газ, заключенный в ящик объема V при нулевой температуре. Найдем магнитный момент электронного газа, связанный с магнитным моментом электрона, т.е. парамагнитные свойства. Обозначим магнитный момент электрона через $\mu = e\hbar/(2mc)$ и считаем, что энергия электрона в магнитном поле H гораздо меньше энергии Ферми: $\mu H \ll \varepsilon_F$. Намагниченность есть

$$M = \mu(N_+ - N_-), \quad (165)$$

где N_+ , N_- – число электронов с магнитным моментом по полю и против поля, соответственно. Энергии верхних заполненных уровней для электронов с магнитным моментом по полю и против поля должны совпадать (иначе электроны будут менять направление спина чтобы сравнять энергии).

Парамагнитные свойства электронного газа

Это приводит к разным значениям импульсов $p_{\pm}$ для электронов с магнитным моментом по полю и против поля на поверхности Ферми. Таким образом граничные импульсы p_+, p_- определяются из соотношения

$$\frac{p_+^2}{2m} - \mu H = \frac{p_-^2}{2m} + \mu H = \varepsilon_F. \quad (166)$$

Следовательно

$$N_+ = \int_0^{p_+} \frac{V 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \approx \frac{N}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_F} \mu H, \quad (167)$$

$$N_- = \int_0^{p_-} \frac{V 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \approx \frac{N}{2} - \frac{1}{2} \frac{\partial N}{\partial \varepsilon_F} \mu H, \quad (168)$$

где N – полное число электронов

$$N = 2 \int_0^{p_F} \frac{V 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = N(\varepsilon_F) = N_+ + N_-. \quad (169)$$

Приложение к астрофизике.

Таким образом намагниченность равна

$$\begin{aligned} M &= \mu(N_+ - N_-) \approx \mu \frac{\partial(N)}{\partial \varepsilon_F} \mu H = \\ &= \mu^2 H \frac{3N}{2\varepsilon_F} = \mu^2 H \frac{3NmV^{2/3}}{\hbar^2(3\pi^2N)^{2/3}} \sim N^{1/3}. \end{aligned} \quad (170)$$

Нелинейная зависимость намагниченности от числа частиц $M \sim N^{1/3}$ является следствием принципа Паули.

Приложение к астрофизике.

Когда в обычной звезде выгорает заметная часть водорода, термоядерная реакция прекращается и звезда, излучая, будет остывать и сжиматься. При сжатии гравитационная энергия уменьшается

$$E_g \sim -\frac{GM^2}{R}, \quad (171)$$

однако энергия электронного газа возрастает

$$E_e \sim N_e \varepsilon_F \sim N_e \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{N_e}{V} \right)^{2/3} \sim \frac{\hbar^2}{m_e R^2} \left(\frac{M}{m_p} \right)^{5/3}. \quad (172)$$

В результате холодная звезда, называемая белым карликом, достигнет некоторого равновесного радиуса, определяемого условием минимума полной энергии

Приложение к астрофизике.

Из минимума полной энергии

$$E = -\frac{GM^2}{R} + \frac{\hbar^2}{m_e R^2} \left(\frac{M}{m_p} \right)^{5/3} \quad (173)$$

следует выражение для радиуса белого карлика

$$\begin{aligned} R_{\text{бк}} &\approx \frac{\hbar^2}{G m_e m_p^{5/3} M^{1/3}} \approx \\ &\approx \frac{10^{-54}}{7 \cdot 10^{-8} \cdot 10^{-27} (1,6 \cdot 10^{-24})^{5/3} (2 \cdot 10^{33})^{1/3}} \approx 10^9 \text{ см} = 10^4 \text{ км} \end{aligned} \quad (174)$$

Приложение к астрофизике.

Если звезда на начальной стадии имела массу, заметно большую массы Солнца, или масса белого карлика может увеличиваться за счет захвата(аккреции) окружающего вещества, то газ электронов может стать ультрарелятивистским.

Оценим предельное значение массы белого карлика.

Энергия ультрарелятивистского ферми-газа определяется выражением

$$E_{\text{ур}} \approx N_e p_F c \approx \frac{\hbar c M^{4/3}}{R m_p^{5/3}}, \quad (175)$$

где p_F — импульс Ферми.

Приложение к астрофизике.

Выражение для гравитационной энергии и энергии ультрарелятивистских электронов имеют одинаковую зависимость от радиуса звезды, а это означает, что при $E < 0$ звезда будет неограниченно сжиматься, т.е. у белого карлика есть предельное значение массы M_* , определяемое выражением

$$M_* \approx \frac{1}{m_p^2} \left(\frac{\hbar c}{G} \right)^{3/2} \approx \frac{1}{3 \cdot 10^{-48}} \left(\frac{10^{-27} 3 \cdot 10^{10}}{7 \cdot 10^{-8}} \right)^{3/2} \approx 3 \cdot 10^{33} \text{ г} \quad (176)$$

Эту величину называют пределом Чандрасекара в честь индийского физика, впервые установившего существование предельного значения массы белого карлика.

Приложение к астрофизике.

Покажем законность пренебрежения кулоновским взаимодействием между заряженными частицами при таких больших плотностях. Для нерелятивистского электронного газа это условие имеет вид

$$\frac{e^2}{r_0} \approx e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \ll \varepsilon_F \approx \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (177)$$

что эквивалентно

$$\begin{aligned} \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} &\approx \left(\frac{M}{m_p R^3} \right)^{1/3} \approx \left(\frac{2 \cdot 10^{33}}{1,6 \cdot 10^{-24} \cdot 10^{27}} \right)^{1/3} \approx 10^{10} \text{ см}^{-1} \gg \\ &\gg \frac{e^2 m_e}{\hbar^2} = \frac{1}{a_B} \approx 10^8 \text{ см}^{-1}. \end{aligned} \quad (178)$$

Приложение к астрофизике.

Для ультрарелятивистского случая условие принимает вид

$$\frac{e^2}{r_0} \approx e^2 \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \ll p_F c \approx \hbar c \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3} \quad (179)$$

или

$$\frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \ll 1 \quad (180)$$

Приложение к астрофизике.

Если масса белого карлика превышает предел Чандрасекара, то начинается сжатие звезды и становится возможной реакция обратного β -распада $e^- + p \rightarrow n + \nu$, т.е. происходит нейтронизация вещества и образуется нейтронная звезда. В 1987 г. нейтрино ν , испущенные в этой реакции при вспышке сверхновой звезды в Большом Магеллановом облаке, были зарегистрированы детекторами на Земле. Радиус нейтронной звезды находится также как для белого карлика с заменой $m_e \rightarrow m_n$ (теперь основной вклад в энергию дают нерелятивистский нейтронный газ)

$$R_{\text{нз}} \approx \frac{\hbar^2}{G m_p^{8/3} M^{1/3}} \approx \frac{m_e}{m_p} R_{\text{бк}} \approx 10 \text{ км.} \quad (181)$$

Также как для белого карлика, для нейтронной звезды существует верхний предел массы

$$M_* \approx \frac{1}{m_n^2} \left(\frac{\hbar c}{G} \right)^{3/2} \approx 3 \cdot 10^{33} \text{ г.} \quad (182)$$

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 5 Молекулярная связь.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Молекулярный ион водорода

Самой простой молекулярной системой является молекулярный ион водорода, состоящий из двух ядер (протонов) и одного электрона. Поскольку массы ядер много больше массы электрона, сначала можно решить задачу с неподвижными ядрами, расположенными на некотором расстоянии друг от друга R , а затем учесть их движение. Таким образом гамильтониан всей системы $\hat{H}$ представим как сумму

$$\hat{H} = \hat{H}_{el}(r, R) + \hat{H}_{nuc}(R), \quad (183)$$

а волновую функцию как произведение

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \psi_{el}(\vec{r}, R) \psi_{nuc}(\vec{R}). \quad (184)$$

двух частей, относящихся к электрону (индекс “ el ”) и ядрам (индекс “ nuc ”). Волновая функция и гамильтониан для электрона зависят от расстояния между ядрами R как от параметра.

Молекулярный ион водорода

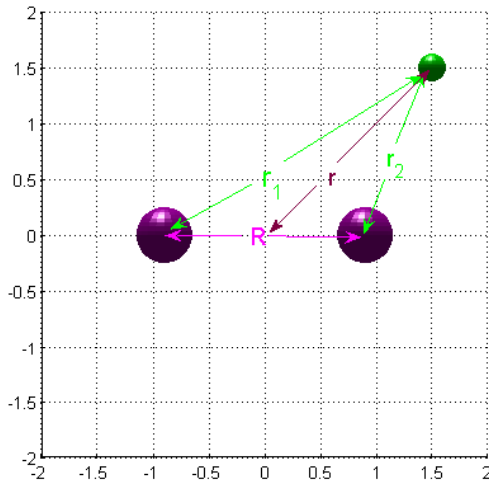
Гамильтониан, описывающий движение электрона в молекулярном ионе водорода имеет вид

$$\hat{H}_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{R}/2|} - \frac{e^2}{|\vec{r} + \vec{R}/2|} + \frac{e^2}{R}, \quad (185)$$

где начало координат выбрано посередине между ядрами, так что $|\vec{r} \pm \vec{R}/2|$ – расстояния между электроном и ядрами, R – расстояние между ядрами, m – масса электрона.

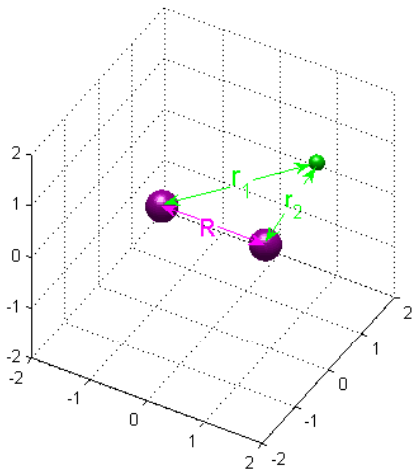
Молекулярный ион водорода

Показано взаимное расположение двух протонов и электрона. Размеры частиц сильно преувеличены.



Молекулярный ион водорода

Пространственное расположение двух протонов и электрона. Размеры частиц сильно преувеличены.



Молекулярный ион водорода

Первый член в гамильтониане описывает кинетическую энергию электрона, второй и третий члены – потенциальную энергию притяжения (знак “–”) электрона к ядрам, расположенным на расстояниях $r_{1,2} = |\vec{r} \pm \vec{R}/2|$, последний член – кулоновское отталкивание (знак “+”) протонов, расположенных друг от друга на расстоянии R .

Для решения задачи используем вариационный подход. Качественно понятно, что электрон предпочтительно должен находиться где-то посередине между ядрами, чтобы было притяжение и образовалось связанное состояние. В качестве нормированной пробной волновой функции возьмем

$$\psi_{tr} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}, \quad (186)$$

где вариационный параметр α подбирается из условия минимума средней энергии $\bar{E}_{el}$

Молекулярный ион водорода

$$\begin{aligned}\bar{E}_{el} = \langle \psi_{tr} | \hat{H}_{el} | \psi_{tr} \rangle = & -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_{tr}(r) \Delta_r \psi_{tr}(r) d^3r - \\ & -e^2 \int \psi_{tr}^2(r) \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}/2|} + \frac{1}{|\vec{r} + \vec{R}/2|} \right) d^3r + \frac{e^2}{R}. \quad (187)\end{aligned}$$

Первый интеграл равен

$$\begin{aligned}I_1 = & -\frac{\hbar^2 \alpha^3}{2m\pi} \int_0^\infty e^{-\alpha r} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{de^{-\alpha r}}{dr} \right) 4\pi r^2 dr = \\ = & -\frac{2\hbar^2 \alpha^3}{m} \left(-\frac{1}{2\alpha} \int_0^\infty x e^{-x} dx + \frac{1}{8\alpha} \int_0^\infty x^2 e^{-x} dx \right) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}. \quad (188)\end{aligned}$$

Молекулярный ион водорода

Второй интеграл равен потенциальной энергии притяжения электрона к ядру $e\phi(r_1)$, где $\phi(r_1)$ есть потенциал, создаваемый сферически симметричным относительно начала координат электронным распределением с плотностью заряда $\rho(r) = -e|\psi_{tr}(r)|^2$ в точке расположения ядра $r_1 (= R/2)$:

$$\phi(r_1) = -\frac{e\alpha^3}{r_1\pi} \int_0^{r_1} e^{-2\alpha r} 4\pi r^2 dr - \frac{e\alpha^3}{\pi} \int_{r_1}^{\infty} \frac{e^{-2\alpha r}}{r} 4\pi r^2 dr. \quad (189)$$

Первый член – вклад от области $r \leq r_1$, равен

$$-\frac{e}{2r_1} (-4\alpha^2 r_1^2 e^{-2\alpha r_1} - 4\alpha r_1 e^{-2\alpha r_1} + 2 - 2e^{-2\alpha r_1}). \quad (190)$$

Второй член – вклад от области $r > r_1$, равен

$$-e\alpha (2\alpha r_1 e^{-2\alpha r_1} + 2e^{-2\alpha r_1}). \quad (191)$$

Молекулярный ион водорода

Точно такой же вклад получается от взаимодействия электрона со вторым ядром (очевидно из симметрии).

Собирая все вклады, получим

$$\bar{E}_{el}(\alpha, R) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} + \frac{e^2}{R} - \frac{4e^2}{R} (1 - e^{-\alpha R}) + 2e^2 \alpha e^{-\alpha R}. \quad (192)$$

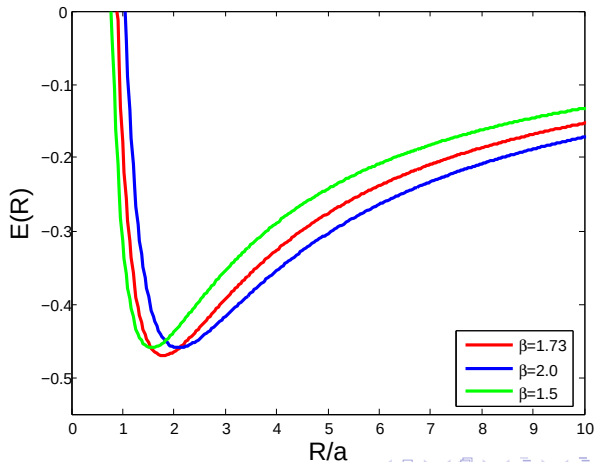
Введем новые параметры $\beta = \alpha R$, $x = R/a$, где $a = \hbar^2 / me^2$ – боровский радиус. Тогда

$$\bar{E}_{el}(\beta, x) = \frac{e^2}{a} \left[\frac{\beta^2}{2x^2} - \frac{3}{x} + \frac{2}{x}(\beta + 2)e^{-\beta} \right]. \quad (193)$$

Численная минимизация этого выражения по параметрам β, x позволяет найти, что минимальное значение энергии достигается при значениях параметров $\beta = 1.73$, $R = 1.8a$ и равно $E_0 = -0.47e^2/a = -12.8$ эВ.

Молекулярный ион водорода

Зависимость средней энергии от расстояния между ядрами для нескольких значений параметра β .



Молекулярный ион водорода

Теперь рассмотрим движение ядер. Найденную зависимость энергии электрона как функцию расстояния между ядрами R , представим в виде

$$\bar{E}_0(R) = \frac{A}{R^2} - \frac{B}{R}, \quad (194)$$

где

$$A = e^2 a \frac{\beta_0^2}{2}, \quad B = e^2 (3 - 2(\beta_0 + 2)e^{-\beta_0}).$$

Уравнение Шредингера в системе покоя центра масс принимает вид

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = (\hat{H}_{el} + \hat{H}_{nuc}(R)) \psi_{el}(\vec{r}, R) \psi_{nuc}(\vec{R}) = E \psi_{el}(\vec{r}, R) \psi_{nuc}(\vec{R}), \quad (195)$$

Тогда с учетом соотношения

$$\hat{H}_{el} \psi_{el}(\vec{r}, R) = E_0(R) \psi_{el}(\vec{r}, R) \quad (196)$$

получаем уравнение, описывающее движение ядер

$$\hat{H}_{nuc}(R) \psi_{nuc}(\vec{R}) + E_0(R) \psi_{nuc}(\vec{R}) = E \psi_{nuc}(\vec{R}). \quad (197)$$

Молекулярный ион водорода

Таким образом величину $E_0(R)$ можно рассматривать как потенциальную энергию взаимодействия ядер. Рассмотрим сначала приближенное решение полученного уравнения. Если взять энергию в минимуме $R = R_0 = 2A/B$, $E_0(R) = E_0(R_0) = -B^2/4A$, то ядра могут только вращаться вокруг центра масс. Уравнение Шредингера сводится к

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\theta,\phi}Y_{l,m} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2MR_0^2}Y_{l,m} = (E - E_0(R_0))Y_{l,m}, \quad (198)$$

где $M = m_p/2$ – приведенная масса двух ядер (протонов) с массой m_p каждое. В этом приближении энергия равна

$$E = E_0(R_0) + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}}l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (199)$$

где момент инерции молекулы $\mathcal{I} = MR_0^2 = 4MA^2/B^2$.

Молекулярный ион водорода

Раскладывая энергию $E_0(R)$ до второго порядка вблизи минимума

$$E_0(R) \approx E_0 + E''(R_0) \frac{(R - R_0)^2}{2} = E_0 + \frac{M\Omega^2(R - R_0)^2}{2}, \quad (200)$$

$\Omega^2 = B^4/(8MA^3)$, получим гамильтониан гармонического осциллятора, так что теперь энергия молекулы складывается из электронной, колебательной и вращательной частей:

$$E = E_0(R_0) + \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (201)$$

Молекулярный ион водорода

Теперь получим точное решение для $E_0(R) = A/R^2 - B/R$. Решение уравнения Шредингера в центральном поле

$$-\frac{\hbar^2}{2M} (\Delta_R + \Delta_{\theta,\phi}) \psi_{nuc}(\vec{R}) + \left(\frac{A}{R^2} - \frac{B}{R} \right) \psi_{nuc}(\vec{R}) = E \psi_{nuc}(\vec{R}) \quad (202)$$

ищем в виде произведения угловой и радиальной частей

$$\psi_{nuc}(\vec{R}) = Y_{l,m}(\theta, \phi) F_{nuc}(R) \quad (203)$$

и получаем уравнение для радиальной части

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R F(R) + \frac{\hbar^2}{2MR^2} \left(l(l+1) + \frac{2MA}{\hbar^2} \right) F(R) - \frac{B}{R} F(R) = E F(R) \quad (204)$$

по виду совпадающее с уравнением для радиальной части волновой функции атома водорода (лекция 10).

Молекулярный ион водорода

Вместо квадрата заряда имеем $e^2 \rightarrow B$, вместо квантового числа орбитального момента имеем $l'(l' + 1) \rightarrow l(l + 1) + 2MA/\hbar^2$ то есть

$$l' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2MA}{\hbar^2}}.$$

Таким образом энергия молекулярного иона водорода равна

$$\begin{aligned} E &= -\frac{MB^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_R + l' + 1)^2} = \\ &= -\frac{MB^2}{2\hbar^2} \frac{1}{(n_R + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 + 2MA/\hbar^2})^2}. \end{aligned} \quad (205)$$

Молекулярный ион водорода

Оценим величину

$$\frac{2MA}{\hbar^2} = \frac{2M\hbar^2\beta^2}{2m\hbar^2} \sim \frac{M}{m} \gg 1. \quad (206)$$

Значит можно разложить подкоренное выражение, получая

$$E \approx -\frac{B^2}{4A} \left(1 + \sqrt{\frac{\hbar^2}{2MA}}(n_R + 1/2) + \frac{\hbar^2}{4MA}(l + 1/2)^2 \right)^{-2}. \quad (207)$$

Второй член в круглых скобках описывает колебания ядер, третий – вращение. Электронная энергия больше колебательной в $\sim \sqrt{M/m}$ раз, колебательная энергия больше вращательной тоже $\sim \sqrt{M/m}$ раз.

Молекулярный ион водорода

Если еще раз разложить полученное выражение для энергии по малому параметру $\sqrt{m/M}$, получим приведенный выше приближенный результат

$$\begin{aligned} E &\approx -\frac{B^2}{4A} + \frac{\hbar B^2}{\sqrt{8MA^3}}(n_R + 1/2) + \frac{\hbar^2 B^2}{8MA^2}l(l+1) \equiv \\ &\equiv E_0(R_0) + \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}}l(l+1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (208)$$

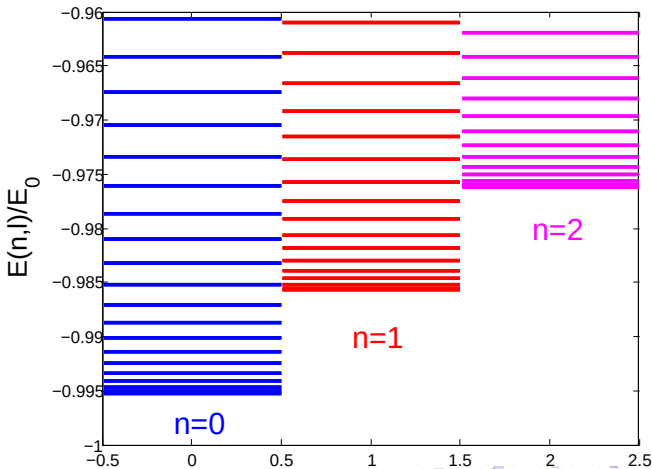
На самом деле надо еще добавить к этому выражению член того же порядка

$$-\frac{3\hbar^2 B^2}{2MA^2}(n_R + 1/2)^2, \quad (209)$$

который немного уменьшает расстояния между колебательными уровнями с ростом квантового числа n_R .

Молекулярный ион водорода

Низколежащие колебательно-вращательные уровни энергии молекулярного иона водорода.



КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 6 Нестационарная теория возмущений.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Нестационарная теория возмущений

Во многих задачах квантовой механике изучаются зависящие от времени (нестационарные) процессы. Например, рассеяние частиц на атомах или молекулах, воздействие внешних зависящих от времени электрических или магнитных полей на атомные системы и т.д. В случае слабого взаимодействия можно опять применить теорию возмущений, однако в нестационарном случае мы ищем вероятности перехода между различными состояниями. В нестационарном уравнении Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(r, t) \quad (210)$$

разделим гамильтониан системы на две части

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad (211)$$

Нестационарная теория возмущений

где для $\hat{H}_0$ мы знаем решение

$$\Psi_n^0(r, t) = \psi_n^{(0)}(r) e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}, \quad \hat{H}_0 \psi_n^{(0)}(r) = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}(r), \quad (212)$$

а часть $\hat{V}(t)$, называемая возмущением, зависит от времени. Если система в начале находилась в стационарном состоянии $\psi_n^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана $\hat{H}_0$, то под действием возмущения $\hat{V}(t)$ система может перейти в другое состояние $\psi_m^{(0)}$. Ищем решение уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(r, t) \quad (213)$$

в виде разложения по собственным функциям невозмущенного гамильтониана

$$\Psi(r, t) = \sum_k b_k(t) \psi_k^{(0)}(r) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}. \quad (214)$$

Нестационарная теория возмущений

После подстановки в уравнение Шредингера имеем

$$\begin{aligned} \sum_k \left(E_k^{(0)} b_k(t) + \frac{db_k(t)}{dt} \right) \psi_k^{(0)}(r) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} = \\ = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \sum_k b_k(t) \psi_k^{(0)}(r) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}. \end{aligned} \quad (215)$$

Поскольку

$$\hat{H}_0 \psi_k^{(0)}(r) = E_k^{(0)} \psi_k^{(0)}(r), \quad (216)$$

получаем

$$\sum_k \frac{db_k(t)}{dt} \psi_k^{(0)}(r) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar} = \sum_k b_k(t) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(r) e^{-iE_k^{(0)}t/\hbar}. \quad (217)$$

Нестационарная теория возмущений

Умножим обе части слева на $\psi_n^{(0)*}(r)$ и проинтегрируем по координатам. С учетом условия ортонормированности функций

$$\int \psi_n^{(0)*}(r) \psi_k^{(0)}(r) d^3r = \delta_{nk}, \quad (218)$$

получаем уравнение

$$\begin{aligned} \frac{db_n(t)}{dt} &= \sum_k b_k(t) \int \psi_n^{(0)*}(r) \hat{V}(t) \psi_k^{(0)}(r) d^3r e^{i(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar} = \\ &= \sum_k b_k(t) \hat{V}_{nk}(t) e^{i(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})t/\hbar}. \end{aligned} \quad (219)$$

Нестационарная теория возмущений

Если в начальный момент времени $t = 0$ система находилась в состоянии i , то есть $b_k(0) = \delta_{ki}$, в первом приближении

$$b_n(t) \approx -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_{ni}(t) e^{i(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})t/\hbar} dt. \quad (220)$$

Тогда вероятность найти систему в состоянии $n (\neq i)$ в момент времени t равна

$$P_n(t) = |b_n(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t \hat{V}_{ni}(t) e^{i(E_n^{(0)} - E_i^{(0)})t/\hbar} dt \right|^2. \quad (221)$$

Условие применимости теории возмущений – $|b_n(t)| \ll 1$.

Нестационарная теория возмущений

Пример 1. Найдём вероятность перехода из основного состояния гармонического осциллятора в возбуждённые состояния под действием потенциала вида

$$\hat{V} = \frac{Ax^2}{1 + t/\tau^2}, \quad (222)$$

который медленно включается при $t_1 \ll -\tau$, а затем медленно выключается при $t_2 \gg +\tau$. Выразим оператор координаты через операторы рождения и уничтожения (лекция 3)

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (223)$$

Матричный элемент

$$V_{10} \sim \langle 1 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | 0 \rangle = 0. \quad (224)$$

Отличен от нуля только матричный элемент

$$V_{20} \sim \langle 2 | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | 0 \rangle = \langle 2 | \hat{a}^{\dagger 2} | 0 \rangle = \sqrt{2}. \quad (225)$$

Нестационарная теория возмущений

По формуле (221) находим

$$P_{20} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A\sqrt{2}\hbar}{2m\omega} \frac{1}{1+t^2/\tau^2} e^{i(5\hbar\omega/2 - \hbar\omega/2)t/\hbar} dt \right|^2. \quad (226)$$

Интеграл вычисляем методом интегрирования по контуру

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{1+t^2/\tau^2} e^{i2\hbar\omega t/\hbar} dt = \tau^2 2\pi i \frac{e^{-2\omega\tau}}{2i\tau} = \pi\tau e^{-2\omega\tau}. \quad (227)$$

Окончательно

$$P_{20} = \frac{A^2 \pi^2 \tau^2}{2m^2 \omega^2} e^{-4\omega\tau}. \quad (228)$$

Это выражение имеет максимум (как функция τ) при $\tau = 1/2\omega$, то есть наиболее эффективное возбуждение происходит если характерное время нарастания возмущение τ сравнимо с периодом колебания осциллятора $T = 2\pi/\omega$.

Периодическое возмущение

Часто встречается случай, когда возмущение имеет периодический характер (например воздействие на атом монохроматического света)

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 e^{-i\omega t}. \quad (229)$$

Тогда вероятность перехода по формуле (221) равна

$$P_{ni} = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n | \hat{V}_0 | i \rangle|^2 \left| \int_0^t e^{i(\omega_{ni} - \omega)t} dt \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle n | \hat{V}_0 | i \rangle|^2 4 \frac{\sin^2((\omega_{ni} - \omega)t/2)}{(\omega_{ni} - \omega)^2}, \quad (230)$$

где $\omega_{ni} = (E_n^{(0)} - E_i^{(0)})/\hbar$.

Периодическое возмущение

Функция

$$\frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2}, \quad (231)$$

где $\Delta\omega \equiv \omega_{ni} - \omega$, при $\omega_{ni}t \gg 1$ имеет узкую ширину ($\sim 1/t$) и высокий максимум ($\sim t^2$), т.е. пропорциональна $t\delta(\Delta\omega)$

$$\frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2} = At\delta(\Delta\omega). \quad (232)$$

Коэффициент A найдем интегрируя обе части этого выражения по $\Delta\omega$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2} d\Delta\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t}{2} \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{\Delta\omega^2 t^2/4} d(\Delta\omega t/2) = \frac{\pi t}{2} = At, \quad (233)$$

Переходы под действием постоянного возмущения

где использовано значение интеграла

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(y)}{y^2} dy = - \int_{-\infty}^{+\infty} \sin^2(y) d\frac{1}{y} = - \frac{\sin^2(y)}{y} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(2y)}{2y} d(2y) = \pi. \quad (234)$$

Следовательно вероятность перехода в единицу времени (скорость перехода) равна

$$\frac{P_{ni}}{t} \equiv \dot{P}_{ni} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{V}_0 | i \rangle|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)} - \hbar\omega). \quad (235)$$

Переходы под действием постоянного возмущения

Пример 2. Найдем вероятность перехода под действием постоянного возмущения из одного состояния двухуровневой системы в другое. Ищем решение уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & V_{01} \\ V_{10} & E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \end{pmatrix}. \quad (236)$$

в виде

$$\begin{pmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \end{pmatrix} = e^{-iEt/\hbar} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix}, \quad (237)$$

получая уровни энергии

$$E_{\pm} = \frac{E_0 + E_1}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_0 - E_1)^2}{4} + V^2} \quad (238)$$

Переходы под действием постоянного возмущения

и соотношения между коэффициентами

$$(E_{\pm} - E_0)a_0 = V_{01}a_1. \quad (239)$$

Для вырожденных уровней, $E_1 = E_0$, и начального условия

$$\begin{pmatrix} C_0(0) \\ C_1(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (240)$$

получаем

$$E_{\pm} = E_0 \pm V, \quad (241)$$

Переходы под действием постоянного возмущения

$$\begin{aligned}\Psi(t) = \begin{pmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \end{pmatrix} &= e^{-i(E_0+V)t/\hbar} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-i(E_0-V)t/\hbar} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \\ &= e^{-iE_0t/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(Vt/\hbar) \\ -i \sin(Vt/\hbar) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (242)$$

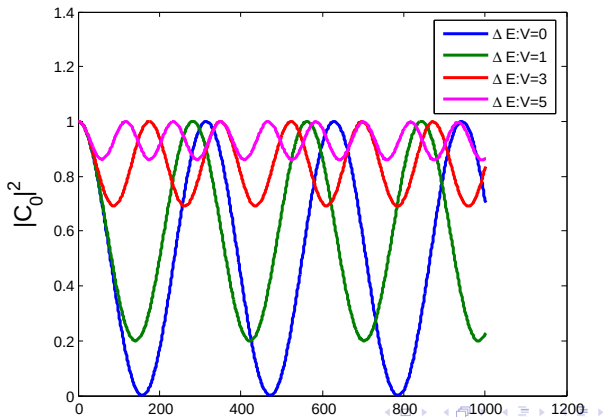
Если при $t = 0$ система находилась в состоянии $|0\rangle$, то вероятность остаться в этом состоянии равна

$$|C_0|^2 = \cos^2(Vt/\hbar). \quad (243)$$

Для невырожденных уровней, $\Delta E = E_1 - E_0 \neq 0$, вероятность перехода в другое состояние становится меньше единицы в любой момент времени, как показано на следующих графиках.

Переходы под действием постоянного возмущения

Показана зависимость от времени вероятности нахождения на уровне $|0\rangle$ для различных значений разности уровней энергии двухуровневой системы, подверженной постоянному возмущению V .



Переходы под действием постоянного возмущения

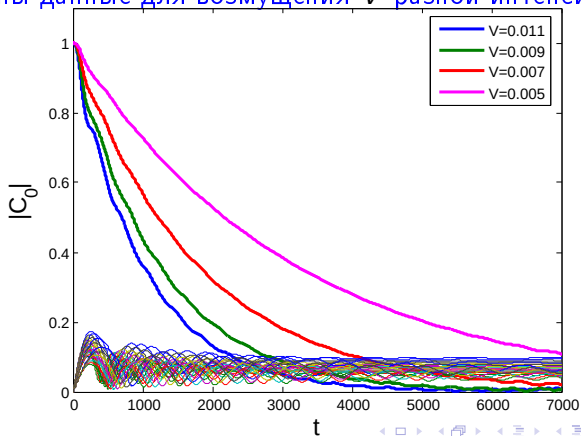
Часто представляет интерес переход не в единственное состояние, а в узкий интервал состояний вблизи некоторого значения. Формула (235) позволяет определить скорость перехода под действием постоянного возмущения. Полагая $\omega = 0$ и переходя от суммирования по дискретным уровням к интегрированию по энергии, получим

$$\dot{P}_{ni} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{V}_0 | i \rangle|^2 d\nu. \quad (244)$$

где $d\nu$ – плотность состояний. Конкретные примеры приведены в лекциях 7, 11. Ниже приведен пример численного моделирования эволюции квантовой системы, состоящей из 60 состояний под действием постоянного возмущения. Первоначально система находилась в одном состоянии. Вероятность же остаться в начальном состоянии i экспоненциально уменьшается со временем (в отличие от двухуровневой системы).

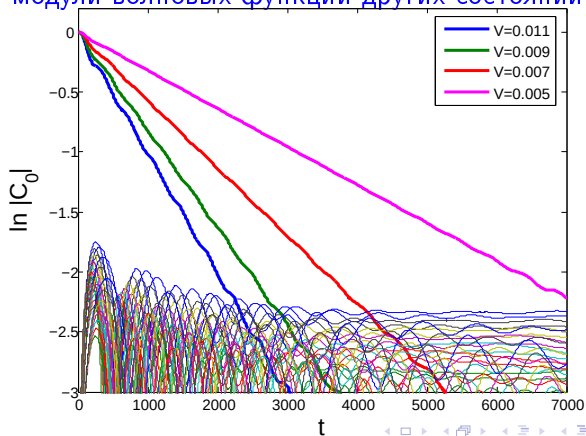
Переходы под действием постоянного возмущения

Приведена зависимость модуля волновой функции начального состояния $|C_0|$ от времени для системы из 60 близко расположенных уровней. Показаны данные для возмущения V разной интенсивности.



Переходы под действием постоянного возмущения

Зависимость логарифма модуля волновой функции начального состояния $\ln |C_0|$, показывающая экспоненциальное уменьшение. Показаны также модули волновых функций других состояний.



Внезапное возмущение

Некоторые процессы характеризуются очень быстрым (внезапным) включением возмущения, т.е. характерное время включения возмущения гораздо меньше характерного времени изменения параметров рассматриваемой системы. Приведем конкретные примеры

Пример 1. Рассмотрим атом водорода в основном состоянии.

Внезапно импульс ядра меняется на величину P , например при столкновении с быстрым нейтроном, который почти не действует на электрон, так как не имеет заряда. Какова вероятность что атом водорода останется в основном состоянии? После столкновения центр масс атома водорода движется с импульсом P , так что волновая функция основного состояния имеет вид

$$\psi'_0(r) = e^{i\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar} \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}. \quad (245)$$

Внезапное возмущение

Тогда вероятность остаться в основном состоянии, то есть перехода $0 \rightarrow 0'$, равна

$$P_{0 \rightarrow 0'} = \left| \int (\psi'_0(r))^* \psi_0(r) d^3r \right|^2 = \left| \int e^{-i\vec{P} \cdot \vec{r}/\hbar} \frac{e^{-2r/a}}{\pi a^3} d^3r \right|^2. \quad (246)$$

Интегрирование по углам дает

$$\int_0^\pi e^{-iPr \cos \theta / \hbar} 2\pi \sin \theta d\theta = \frac{2\pi}{iPr/\hbar} \left(e^{iPr/\hbar} - e^{-iPr/\hbar} \right). \quad (247)$$

Внезапное возмущение

Тогда

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow 0'} &= \left| \frac{2}{iPa^3/\hbar} \int_0^\infty re^{-2r/a} \left(e^{iPr/\hbar} - e^{-iPr/\hbar} \right) \right|^2 = \\ &= \left| \frac{1}{2iPa/\hbar} \left[\frac{1}{(1 - iPa/2\hbar)^2} - \frac{1}{(1 + iPa/2\hbar)^2} \right] \right|^2 = \frac{1}{(1 + P^2 a^2 / 4\hbar^2)^4}. \end{aligned} \quad (248)$$

Если импульс отдачи ядра достаточно большой, $P \gg \hbar/a$, то вероятность остаться в основном состоянии мала.

Внезапное возмущение

Пример 2. Эффект Мессбауэра. Рассмотрим простую модель, когда радиоактивное ядро в кристалле рассматривается как движущееся в потенциале гармонического осциллятора с характерной частотой порядка $\omega \sim k_B \Theta_D / \hbar$, где k_B – постоянная Больцмана, Θ_D – температура Дебая, которая характеризует свойства кристаллической решетки. Если свободное радиоактивное ядро испускает гамма-квант, то из закона сохранения импульса ядро получает импульс отдачи $P \approx E_\gamma / c$, так что из закона сохранения энергии гамма-квант имеет энергию

$$E_\gamma \approx E_0 - \frac{P^2}{2M} \approx E_0 - \frac{E_0^2}{2Mc^2}, \quad (249)$$

где E_0 – разность энергий возбужденного и основного состояния ядра, M – масса ядра.

Внезапное возмущение

Для ядра ^{57}Fe энергия отдачи

$$R \equiv \frac{E_0^2}{2Mc^2} \sim \frac{(14.4 \cdot 10^3 \text{эВ})^2}{2 \cdot 57 \cdot 10^9 \text{эВ}} \sim 2 \cdot 10^{-3} \text{эВ}. \quad (250)$$

Ширина линии поглощения гамма-излучения, как увидим позже, определяется временем жизни возбужденного состояния τ

$$\Gamma \sim \frac{\hbar}{\tau} \sim \frac{6 \cdot 10^{-16} \text{эВ} \cdot \text{с}}{10^{-7} \text{с}} \sim 6 \cdot 10^{-9} \text{эВ} \ll R, \quad (251)$$

и гораздо меньше энергии отдачи ядра. Поэтому заметного поглощение гамма-излучения, испущенного свободными ядрами, не происходит.

Внезапное возмущение

Другое дело, если ядро заключено в кристаллическую решетку. В используемой модели гармонического осциллятора есть ненулевая вероятность, что после испускания гамма-кванта ядро останется в том же колебательном состоянии и весь импульс отдачи примет кристалл. Энергия отдачи всего кристалла ничтожна мала и возможно резонансное поглощения гамма-кванта другим не радиоактивным ядром, заключенном в таком же кристалле. Найдем вероятность, что при испускании гамма-кванта ядром, находящимся в основном состоянии потенциала гармонического осциллятора, оно останется в том же основном состоянии

$$P_{0 \rightarrow 0} = \left| \int (\Psi_0(x))^* e^{-iP_x x / \hbar} \Psi_0(x) dx \right|^2. \quad (252)$$

Внезапное возмущение

Для малого импульса отдачи можно разложить экспоненту

$$P_{0 \rightarrow 0} \approx \left| \int (\Psi_0(x))^* \left(1 - iP_x x / \hbar - \frac{P_x^2 x^2}{2\hbar^2} \right) \Psi_0(x) dx \right|^2 = e^{-P_x^2 \langle x^2 \rangle / \hbar^2}. \quad (253)$$

Среднеквадратичное смещение можно найти из теоремы вириала

$$\frac{M\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{\hbar\omega}{4} \rightarrow \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2M\omega}. \quad (254)$$

Таким образом вероятность резонансного поглощения гамма-кванта равна

$$P_{0 \rightarrow 0} = e^{-R/\hbar\omega}, \quad (255)$$

где $R = E_0^2/(2Mc^2)$ – энергия отдачи ядра.

Внезапное возмущение

Вероятность перехода ядра из начального состояния $|0\rangle$ в произвольное состояние $\langle n|$ можно вычислить и для произвольного импульса отдачи ядра. Вероятность, что при испускании гамма-кванта ядром, находящимся в основном состоянии потенциала гармонического осциллятора, оно перейдет в состояние $\langle n|$, равна

$$P_{0 \rightarrow n} = \left| \langle n | e^{-ikx} | 0 \rangle \right|^2, \quad (256)$$

где $k = P_x/\hbar$. Выразим координату ядра, движущегося в потенциале гармонического осциллятора, через операторы рождения и уничтожения (лекция 3-1)

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}). \quad (257)$$

Внезапное возмущение

Тогда

$$\langle n | e^{-ikx} | 0 \rangle = \langle n | e^{\alpha(\hat{a}^\dagger + \hat{a})} | 0 \rangle, \quad (258)$$

где мы обозначили

$$\alpha = -ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}. \quad (259)$$

Функцию от оператора следует понимать как разложение этой функции в ряд Тейлора, например

$$e^{\hat{B}} = 1 + \hat{B} + \frac{1}{2!}\hat{B}^2 + \frac{1}{3!}\hat{B}^3 + \dots \quad (260)$$

Если два оператора не коммутируют $[\hat{B}, \hat{C}] \neq 0$, то

$$e^{\hat{B}+\hat{C}} \neq e^{\hat{B}}e^{\hat{C}}. \quad (261)$$

Внезапное возмущение

Представим выражение $e^{\alpha(\hat{a}^\dagger + \hat{a})}$ в виде

$$e^{\alpha(\hat{a}^\dagger + \hat{a})} = e^{\alpha\hat{a}^\dagger} \hat{f}(\alpha) \quad (262)$$

и найдем неизвестную операторную функцию $\hat{f}$. Из

$$\hat{f}(\alpha) = e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} e^{\alpha(\hat{a}^\dagger + \hat{a})} \quad (263)$$

получаем

$$\frac{d\hat{f}(\alpha)}{d\alpha} = e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} \left(-\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger + \hat{a} \right) e^{\alpha(\hat{a}^\dagger + \hat{a})} = \left(e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} \hat{a} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} \right) \hat{f}(\alpha). \quad (264)$$

Теперь найдем уравнение для операторной функции

$$\hat{g}(\alpha) = e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} \hat{a} e^{\alpha\hat{a}^\dagger}. \quad (265)$$

Имеем

$$\frac{d\hat{g}(\alpha)}{d\alpha} = e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} \left(-\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger \right) e^{\alpha\hat{a}^\dagger} = 1. \quad (266)$$

Внезапное возмущение

Значит, с учетом начального условия $\hat{g}(0) = \hat{a}$, получаем

$$\hat{g}(\alpha) = \hat{a} + \alpha. \quad (267)$$

Подставляя в уравнение для функции f

$$\frac{d\hat{f}(\alpha)}{d\alpha} = (\hat{a} + \alpha)\hat{f}(\alpha), \quad (268)$$

находим

$$\hat{f}(\alpha) = e^{\alpha\hat{a}} e^{\alpha^2/2}. \quad (269)$$

Тогда

$$\langle n | e^{-ikx} | 0 \rangle = \langle n | e^{\alpha(\hat{a}^\dagger + \hat{a})} | 0 \rangle = e^{\alpha^2/2} \langle n | e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{\alpha\hat{a}} | 0 \rangle, \quad (270)$$

где мы обозначили

$$\alpha = -ik\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}. \quad (271)$$

Внезапное возмущение

Используя (260), получаем

$$e^{\alpha \hat{a}} |0\rangle = \left(1 + \alpha \hat{a} + \frac{\alpha^2}{2!} \hat{a}^2 + \dots \right) |0\rangle = |0\rangle, \quad (272)$$

$$\langle n | e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{\alpha \hat{a}} |0\rangle = \langle n | \left(1 + \alpha \hat{a}^\dagger + \dots + \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} + \dots \right) |0\rangle = \langle n | \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \quad (273)$$

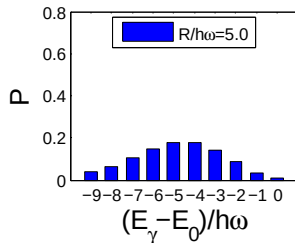
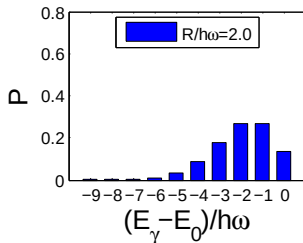
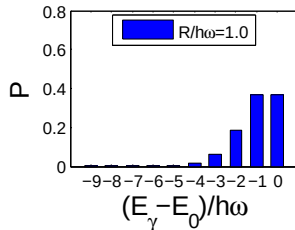
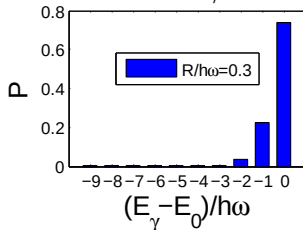
Следовательно вероятность перехода ядра из состояния $|0\rangle$ в состояние $\langle n|$, когда ядро при испускании гамма-кванта получает энергию отдачи R , равна

$$P_{0 \rightarrow n} = \frac{\alpha^{2n}}{n!} e^{\alpha^2} = \frac{1}{n!} \left(\frac{R}{\hbar \omega} \right)^n e^{-R/\hbar \omega}. \quad (274)$$

Получили распределение Пуассона. Ниже приведены графики вероятности $P_{0 \rightarrow n}$ для нескольких значений $R/\hbar \omega$.

Внезапное возмущение

Вероятность излучения с переходом ядра из состояния $|0\rangle$ в состояние $\langle n|$ для нескольких значений $R/\hbar\omega$.



КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

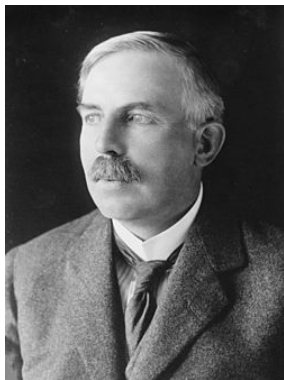
Лекция 7 Рассеяние. Борновское приближение.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Рассеяние частиц.

Рассеяние частиц является одним из основных методов изучения строения атомов, ядер, элементарных частиц, начиная с экспериментов Э. Резерфорда. Направляя узкий пучок α -частиц на золотую фольгу и подсчитав сколько α -частиц отклоняется на различные углы от первоначального направления, Э. Резерфорд сделал вывод, что положительный заряд атома сосредоточен в ядре атома. Позднее он определил, что размер ядра $\sim 10^{-13} \text{ см} \ll a_B$ — боровского размера атома.



Э. Резерфорд

Рассеяние частиц.

Сначала рассмотрим упругое рассеяние легких частиц на тяжелых, считая что взаимодействие можно описать потенциалом центральных сил. Упругое означает, что все частицы не меняют своего внутреннего состояния. Задача состоит в том, чтобы рассчитать для заданного потенциала какое число частиц отклонится на тот или иной угол. Плотность потока частиц определяется с помощью формулы

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \vec{\nabla} \psi^* - \psi^* \vec{\nabla} \psi \right). \quad (275)$$

Для падающих на мишень частиц с импульсом $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ волновая функция

$$\psi_{in} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \rightarrow j_{in} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}. \quad (276)$$

Рассеяние частиц.

Для центрального потенциала волновую функцию упруго рассеянных частиц представляют в виде расходящейся из центра волны

$$\psi_{out} = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (277)$$

Радиальная составляющая плотности потока рассеянных частиц на большом расстоянии равна

$$j_{out} \Big|_{r \rightarrow \infty} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}. \quad (278)$$

Рассеяние частиц.

Число частиц в единицу времени dN/dt , регистрируемых детектором, расположенном на расстоянии r и имеющим площадь dS , равно

$$\frac{dN}{dt} = j_{out} dS = \frac{\hbar k}{m} \frac{dS}{r^2} |f(\theta)|^2. \quad (279)$$

Чтобы можно было сравнивать результаты различных экспериментов, используют величину

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dN/dt}{|j_{in}|} = |f(\theta)|^2, \quad (280)$$

где $d\Omega = dS/r^2$ телесный угол, под которым виден детектор из центра рассеяния. Эта величина называется дифференциальным сечением рассеяния и является площадью, в которую должен попасть пучок падающих частиц, чтобы рассеяться под углом θ в телесный угол $d\Omega$. Величина $f(\theta)$ называется амплитудой рассеяния.

Рассеяние частиц.

Показана классическая картина рассеяния частиц. В детектор площадью dS , расположенный от центра рассеяния на расстоянии R , попадают только те частицы, которые пролетели через площадку $d\sigma$.

Борновское приближение.

Рассмотрим приближенный метод определения амплитуды рассеяния, называемый борновским приближением. Этот метод применим, когда мало воздействие потенциала $U(r)$. Перепишем стационарное уравнение Шредингера в виде

$$k^2\psi(\vec{r}) + \Delta\psi(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r)\psi(\vec{r}). \quad (281)$$

Формальное решение уравнения Шредингера можно записать так

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} \int G(\vec{r} - \vec{r}') U(r') \psi(\vec{r}') d^3r' \equiv \psi_0(\vec{r}) + \psi_1(\vec{r}), \quad (282)$$

где $\psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ волновая функция свободного движения, удовлетворяющая уравнению

$$k^2\psi_0(\vec{r}) + \Delta\psi_0(\vec{r}) = 0, \quad (283)$$

а функция Грина $G(\vec{r} - \vec{r}')$ удовлетворяет уравнению

$$(k^2 + \Delta) G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (284)$$

Борновское приближение.

Решение этого уравнения берем в виде расходящейся волны

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (285)$$

Чтобы найти приближенное решение уравнения (282) подставим в правую часть вместо $\psi(\vec{r}')$ волновую функцию свободного движения и разложим величину

$$k|\vec{r} - \vec{r}'| \approx kr - \frac{k\vec{r} \cdot \vec{r}'}{r} = kr - \vec{k}' \cdot \vec{r}', \quad (286)$$

поскольку детектор находится на большом расстоянии от рассеивающего центра. Тогда получим, что

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}'} U(r') d^3r', \quad (287)$$

Борновское приближение.

Таким образом в борновском приближении амплитуда рассеяния равна

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}'} U(r') d^3r'. \quad (288)$$

где удобно ввести вектор $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$. Модуль этого вектора равен

$$q = \sqrt{(\vec{k}' - \vec{k})^2} = 2k \sin(\theta/2). \quad (289)$$

При изменении угла рассеяния θ в пределах $0 \leq \theta \leq \pi$ модуль вектора $\vec{q}$ изменяется в пределах $0 \leq q \leq 2k$.

Борновское приближение.

Обсудим условия применимости борновского приближения. В этом приближении уравнение Шредингера записывается в виде

$$(k^2 + \Delta) \psi_1 = \frac{2mU}{\hbar^2} \psi_0. \quad (290)$$

Для применимости борновского приближения волновая функция ψ_1 должна быть мала по сравнению с волновой функцией свободного движения $\psi_0 = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. Волновую функцию ψ_1 удобно представить в виде

$$\psi_1 = e^{ikz} f(r), \quad (291)$$

где отличие функции f от единицы обусловлено потенциалом U с характерным размером области действия потенциала R . Оцениваем выражение

$$\begin{aligned} (k^2 + \Delta) e^{ikz} f(r) &= e^{ikz} \left(k^2 - k^2 + 2ik \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) f(r) \sim \\ &\sim \left(\frac{ik}{R} + \frac{1}{R^2} \right) e^{ikz} f(r) \end{aligned} \quad (292)$$

Борновское приближение.

Для медленных частиц $kR \ll 1$ в выражении (292) доминирует второй член, поэтому получаем оценку

$$|\psi_1| \sim \left| \frac{mU_0 R^2}{\hbar^2} \psi_0 \right| \rightarrow U_0 \ll \frac{\hbar^2}{mR^2}, \quad (293)$$

где U_0 – характерная величина потенциальной энергии.

В условие применимости борновского приближения для быстрых частиц $kR \gg 1$ в выражении (292) доминирует первый член, поэтому получаем оценку

$$|\psi_1| \sim \left| \frac{mUR}{k\hbar^2} \psi_0 \right| \rightarrow U_0 \ll \frac{\hbar^2 k}{mR} = \frac{\hbar v}{R}, \quad (294)$$

где v – скорость частиц.

Борновское приближение.

Рассмотрим другой вывод борновского приближения. Для этого используем формулу для вероятности перехода в единицу времени из одного состояния в другое под действием возмущения из лекции 2-6:

$$\dot{P}_{ni} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \hat{U} | i \rangle|^2 \delta(E_n^{(0)} - E_i^{(0)}). \quad (295)$$

В качестве начального состояния в задаче рассеяния используем волновую функцию налетающих частиц с волновым вектором $\vec{k}$, с нормировкой на 1 частицу в объеме V

$$|i\rangle = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}, \quad (296)$$

и аналогично волновую функция рассеянной частицы

$$\langle n | = \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}}. \quad (297)$$

Борновское приближение.

Нас интересует рассеяние в интервал состояний вблизи волнового вектора $\vec{k}'$ в телесный угол $d\Omega$. Число состояний в этом интервале

$$\frac{V k'^2 dk' d\Omega}{(2\pi)^3}, \quad (298)$$

и переходя к интегрированию, получим

$$\dot{P}_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \left| \frac{1}{V} \int e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} U(r) d^3r \right|^2 \delta \left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \frac{V k'^2 dk' d\Omega}{(2\pi)^3}. \quad (299)$$

Борновское приближение.

Выполняя интегрирование по абсолютному значению волнового вектора k' , имеем

$$\dot{P}_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'} = \left| \int e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} U(r) d^3 r \right|^2 \frac{mk d\Omega}{V(2\pi)^2 \hbar^3}. \quad (300)$$

Поделив скорость перехода $\dot{P}_{\vec{k} \rightarrow \vec{k}'}$, на плотность потока налетающих частиц $j = \hbar k / (mV)$, находим дифференциальное сечение рассеяния

$$d\sigma = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \int e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}} U(r) d^3 r \right|^2 d\Omega. \quad (301)$$

Борновское приближение.

Пример 1 Рассмотрим рассеяние на экранированном кулоновском потенциале

$$U(r) = U_0 \frac{e^{-\lambda r}}{r}. \quad (302)$$

Величина $R \equiv 1/\lambda$ имеет смысл характерной длины экранирования. Амплитуда рассеяния равна

$$f(\theta) = -\frac{mU_0}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty r e^{-\lambda r} dr \int_{-1}^{+1} e^{-iqr \cos\theta} 2\pi d \cos\theta. \quad (303)$$

Интегрируя по углу θ получим

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2mU_0}{q\hbar^2} \int_0^\infty e^{-\lambda r} \sin(qr) dr = \\ &= -\frac{2mU_0}{q\hbar^2} \Im \int_0^\infty e^{(-\lambda+iq)r} dr = -\frac{2mU_0}{\hbar^2(q^2 + \lambda^2)} \end{aligned} \quad (304)$$

Борновское приближение.

Дифференциальное сечение рассеяния равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2 U_0^2}{\hbar^4 (q^2 + \lambda^2)^2} = \frac{4m^2 U_0^2}{\hbar^4 (4k^2 \sin^2 \theta/2 + \lambda^2)^2}. \quad (305)$$

Полное сечение рассеяния получается интегрированием по телесному углу. Удобно выразить элемент телесного угла через величину q :

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta = -2\pi d \cos\theta. \quad (306)$$

Поскольку

$$q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta), \quad (307)$$

получаем

$$d\Omega = \frac{\pi}{k^2} dq^2. \quad (308)$$

Борновское приближение.

Полное сечение рассеяния равно

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi m^2 U_0^2}{k^2 \hbar^4} \int_0^{4k^2} \frac{dq^2}{(q^2 + \lambda^2)^2} = \frac{16\pi m^2 U_0^2}{\hbar^4 \lambda^2 (4k^2 + \lambda^2)}. \quad (309)$$

Для медленных частиц $k/\lambda \ll 1$ полное сечение рассеяния равно

$$\sigma_{k \rightarrow 0} = \frac{16\pi m^2 U_0^2}{\hbar^4 \lambda^4} \quad (310)$$

и не зависит от энергии частиц $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Условие применимости $U_0 \ll \hbar^2 \lambda^2 / m$. Для быстрых частиц $k/\lambda \gg 1$ полное сечение рассеяния убывает при увеличении энергии частиц

$$\sigma_{k \rightarrow \infty} = \frac{4\pi m^2 U_0^2}{\hbar^4 \lambda^2 k^2}. \quad (311)$$

Условие применимости $U_0 \ll \hbar \lambda v$.

Борновское приближение.

Используя (305) можно получить формулу Резерфорда, устремляя к нулю параметр λ . Дифференциальное сечение рассеяния в кулоновском потенциале

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r} \quad (312)$$

равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m^2 Z^2 e^4}{4\hbar^4 k^4 \sin^4 \theta/2}. \quad (313)$$

Полное сечение расходится из-за медленного убывания потенциала на больших расстояниях. Условие применимости борновского приближения для быстрых частиц получается подстановкой кулоновского потенциала в оценку

$$\left| \frac{ik}{r} \psi_1 \right| \sim \left| \frac{mZe^2}{\hbar^2 r} \psi_0 \right|. \quad (314)$$

Тогда получаем условие $Ze^2 \ll \hbar v$, то есть $v/c \gg Ze^2/\hbar c = Z/137$ где c – скорость света.

Борновское приближение.

Пример 2. Рассмотрим рассеяние частиц на двухатомной молекуле, состоящей из одинаковых атомов. Обозначим расстояние между ядрами атомов a . Потенциал взаимодействия рассеиваемых частиц и молекулы можно записать в виде

$$U_m(\vec{r}, \vec{a}) = U(\vec{r}) + U(\vec{r} + \vec{a}), \quad (315)$$

где U – потенциал отдельного атома. Амплитуда рассеяния на молекуле в борновском приближении равна

$$\begin{aligned} f_m(\vec{q}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} (U(\vec{r}) + U(\vec{r} + \vec{a})) d^3r = \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} U(\vec{r}) d^3r - \frac{m}{2\pi\hbar^2} e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}} \int e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}+\vec{a})} U(\vec{r} + \vec{a}) d^3r = \\ &= f_a(\vec{q}) (1 + e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}}) \end{aligned} \quad (316)$$

Борновское приближение.

Дифференциальное сечение рассеяния равно

$$\frac{d\sigma_m}{d\Omega} = |f_m(\vec{q})|^2 = \frac{d\sigma_a}{d\Omega} (2 + 2 \cos(\vec{q} \cdot \vec{a})). \quad (317)$$

Для медленных частиц $ka \ll 1$, и значит $qa \ll 1$, получается

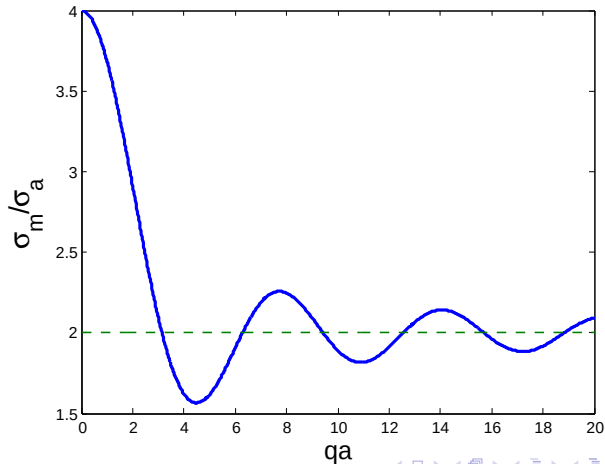
$$\frac{d\sigma_m}{d\Omega} = 4 \frac{d\sigma_a}{d\Omega}. \quad (318)$$

Рассмотрим теперь рассеяние на случайно ориентированных молекулах. Дифференциальное сечение рассеяния необходимо усреднить по всем возможным ориентациям молекул (считаем, что сечение рассеяния на отдельном атоме зависит только от модуля q).

$$\overline{\frac{d\sigma_m}{d\Omega}} = \frac{d\sigma_a}{d\Omega} 2 \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi (1 + \cos(qa \cos \alpha)) 2\pi \sin \alpha d\alpha = \frac{d\sigma_a}{d\Omega} 2 \left(1 + \frac{\sin(qa)}{qa} \right). \quad (319)$$

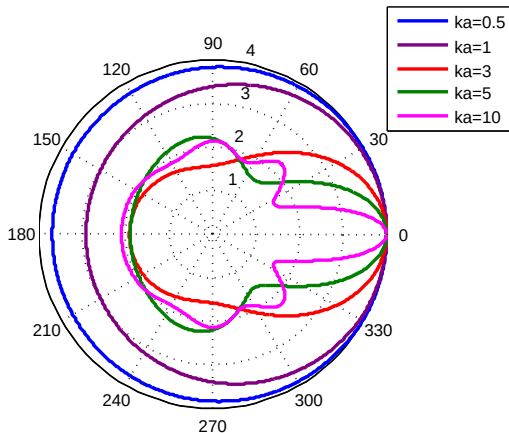
Борновское приближение.

Зависимость отношения дифференциального сечения рассеяния на молекуле к дифференциальному сечению рассеяния на атоме от параметра qa .



Борновское приближение.

Зависимость отношения дифференциальных сечений рассеяния от угла рассеяния в полярных координатах для нескольких значений ka .



Борновское приближение.

Пример 3. Рассеяние электронов на атоме водорода. Потенциал взаимодействия равен

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} + e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}_1) d^3 r_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|}, \quad (320)$$

где первый член описывает взаимодействие с протоном, а второй со средним распределением заряда атомного электрона в атоме водорода. Для основного состояния атома водорода

$$\rho(\vec{r}_1) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r_1/a}, \quad (321)$$

где $a = \hbar^2 / (me^2)$ – боровский радиус.

Борновское приближение.

Амплитуда рассеяния в борновском приближении равна

$$f(\vec{q}) = -\frac{me^2}{2\pi\hbar^2} \left[-\int \frac{1}{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r + \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r \int \frac{\rho(\vec{r}_1) d^3r_1}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \right]. \quad (322)$$

Преобразуем второй интеграл к виду

$$\int \rho(\vec{r}_1) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_1} d^3r_1 \int e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}_1)} \frac{d^3(\vec{r} - \vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|}. \quad (323)$$

Тогда

$$f(\vec{q}) = \frac{me^2}{2\pi\hbar^2} \int \frac{1}{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r (1 - F(q)), \quad (324)$$

где величина

$$F(q) = \int \rho(\vec{r}_1) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_1} d^3r_1 \quad (325)$$

называется атомный форм-фактор.

Борновское приближение.

Интеграл уже вычисляли

$$\int \frac{1}{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3 r = \frac{4\pi}{q^2}. \quad (326)$$

Вычисляем форм-фактор

$$\begin{aligned} F(q) &= \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^2 e^{-2r/a} dr \int_{-1}^{+1} e^{-iqr \cos \theta} 2\pi d \cos \theta = \\ &= \frac{4}{a^3 q} \int_0^\infty r e^{-2r/a} \sin(qr) dr = \frac{4}{a^3 q} \Im \int_0^\infty r e^{-2r/a + iqr} dr = \\ &= \frac{4}{a^3 q} \Im \frac{1}{(2/a - iq)^2} = \frac{1}{(1 + q^2 a^2/4)^2} \end{aligned} \quad (327)$$

Полученный результат согласуется с общим свойством форм-фактора

$$\lim_{q \rightarrow 0} F(q) = \int \rho(r) d^3 r = 1. \quad (328)$$

Борновское приближение.

Отвлечемся от нашей задачи и вычислим форм-фактор для других законов распределения заряда. Для

$$\rho(\vec{r}) = \rho_0 e^{-r^2/R^2} \quad (329)$$

получаем

$$F(q) = \int \rho_0(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3r =$$
$$\rho_0 \int e^{-x^2/R^2} e^{-iq_x x} dx \int e^{-y^2/R^2} e^{-iq_y y} dy \int e^{-z^2/R^2} e^{-iq_z z} dz = e^{-q^2 R^2/4}, \quad (330)$$

где пред экспоненциальный множитель находится из условия нормировки $F(q=0) = 1$.

Борновское приближение.

Для

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \rho_0, & r < R \\ 0, & r \geq R, \end{cases} \quad (331)$$

имеем

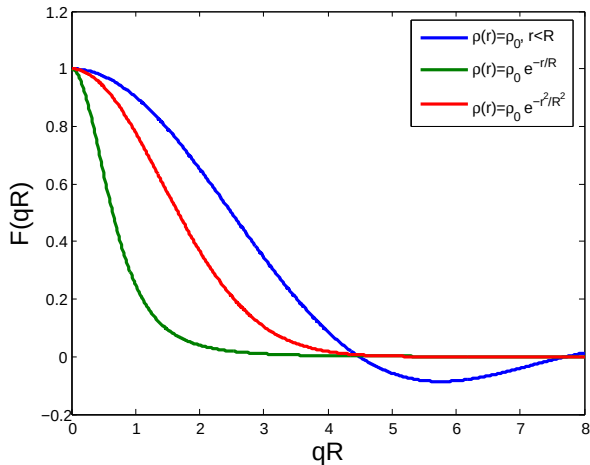
$$\begin{aligned} F(q) &= \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3r = \\ &= \frac{4\pi\rho_0}{q} \int_0^R r dr \sin(qr) = 3 \frac{\sin(qR) - qR \cos(qR)}{(qR)^3}, \end{aligned} \quad (332)$$

где множитель ρ_0 находится из условия нормировки

$$F(q=0) = 1 = \rho_0 \int_0^R 4\pi r^2 dr. \quad (333)$$

Борновское приближение.

Зависимость форм-фактора от qR для некоторых законов распределения плотности рассеивателей.



Борновское приближение.

Возвращаясь к нашей задаче, получаем

$$f(\vec{q}) = \frac{me^2}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{q^2} \left(1 - \frac{1}{(1 + q^2 a^2/4)^2} \right) = \frac{2a(8 + q^2 a^2)}{(4 + q^2 a^2)^2}. \quad (334)$$

Дифференциальное сечение рассеяния равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{q})|^2 = \frac{4a^2(8 + q^2 a^2)^2}{(4 + q^2 a^2)^4}. \quad (335)$$

Полное сечение рассеяния равно

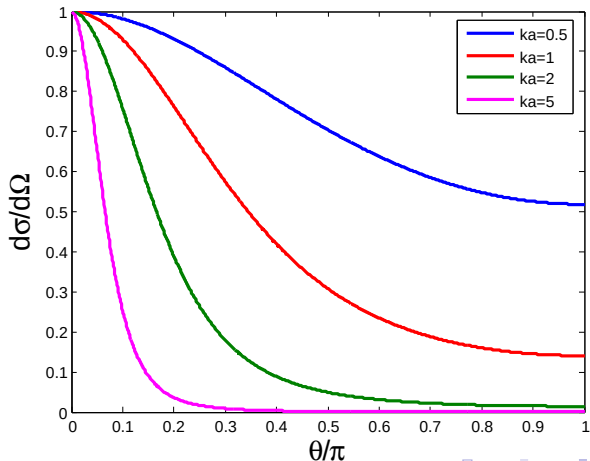
$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \int_0^{4k^2 a^2} \frac{(8 + q^2 a^2)^2 d(q^2 a^2)}{(4 + q^2 a^2)^4}. \quad (336)$$

Для быстрых частиц верхний предел можно распространить до бесконечности и тогда

$$\sigma = \frac{7\pi}{3k^2}. \quad (337)$$

Борновское приближение.

Зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния на атоме водорода от угла рассеяния θ для нескольких значений параметра ka .



КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 8 Рассеяние медленных частиц.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Рассеяние медленных частиц.

Применимость борновского приближения ограничена условием малости величины потенциальной энергии

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{mR^2}. \quad (338)$$

Чтобы описывать рассеяние сильными потенциалами необходимо использовать другой подход. Для медленных частиц условие $kR \ll 1$ означает, что длина волны много больше характерного размера области R , в которой потенциал оказывает заметное воздействие на рассеиваемые частицы и поэтому основной вклад дают сферически симметричные волны.

Рассеяние медленных частиц.

Выделим сферически симметричную часть из полной волновой функции, описывающей падающую и рассеянную волны

$$\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \quad (339)$$

Для этого усредним волновую функцию по всем углам

$$\psi_0 = \frac{1}{4\pi} \int \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \right) 2\pi \sin\theta d\theta = \frac{\sin kr}{kr} + f_0 \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (340)$$

Удобно представить полученный результат как сумму расходящейся от центра рассеяния и сходящейся к центру сферических волн

$$\psi_0 = \left(f_0 + \frac{1}{2ik} \right) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{1}{2ik} \frac{e^{-ikr}}{r}. \quad (341)$$

Рассеяние медленных частиц.

С другой стороны на больших расстояниях сферически симметричное решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_0}{\partial r} \right) + U(r) \psi_0 = E \psi_0 \quad (342)$$

имеет вид

$$\psi_0 = B \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}, \quad (343)$$

где фаза δ_0 обусловлена действием потенциала. Сравнивая два асимптотических выражения для волновых функций, получаем выражение амплитуды рассеяния f_0 через фазу рассеяния δ_0

$$f_0 = \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik}. \quad (344)$$

Рассеяние медленных частиц.

Дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_0|^2 = \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_0, \quad (345)$$

полное сечение рассеяния

$$\sigma = 4\pi |f_0|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (346)$$

Сечение максимально когда $\delta_0 \rightarrow \pi/2$. Таким образом, для нахождения сечения рассеяния в пределе медленных частиц для данного конкретного потенциала необходимо найти сферически симметричное решение уравнения Шредингера.

Рассеяние медленных частиц.

Пример 1. Рассеяние на непроницаемой сфере радиуса R . Решение уравнения Шредингера для $r > R$

$$\psi_0(r) = B \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}, \quad (347)$$

должно удовлетворять граничному условию

$$\psi_0(r = R) = 0, \quad (348)$$

откуда

$$kR + \delta_0 = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (349)$$

Тогда дифференциальное сечение рассеяния равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \sin^2 kR \approx R^2, \quad (350)$$

а полное сечение рассеяния равно

$$\sigma = 4\pi R^2, \quad (351)$$

что в 4 раза превышает геометрическое сечение сферы.

Рассеяние медленных частиц.

Пример 2. Рассеяние на притягивающем потенциале

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R \\ 0, & r > R. \end{cases} \quad (352)$$

В области $r < R$ конечное в начале координат решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\psi_1 = \frac{A \sin(k_1 r)}{r}, \quad (353)$$

где

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + U_0)} \approx \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}. \quad (354)$$

В области $r > R$ решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\psi_2 = \frac{B \sin(kr + \delta_0)}{r}, \quad (355)$$

Рассеяние медленных частиц.

Из условия непрерывности волновых функций и их первых производных на границе $r = R$ получаем

$$\tan(kR + \delta_0) = \frac{k}{k_1} \tan(k_1 R). \quad (356)$$

Если не только $kR \ll 1$ (медленные частицы), но мала и фаза рассеяния $\delta_0 \ll 1$, то имеем

$$\frac{\delta_0}{k} = \frac{1}{k_1} \tan(k_1 R) - R, \quad (357)$$

а амплитуда рассеяния равна

$$f_0 = \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik} \approx \frac{\delta_0}{k} = \frac{1}{k_1} \tan(k_1 R) - R. \quad (358)$$

Рассеяние медленных частиц.

В случае если мал и потенциал,

$$k_1 R = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \ll 1, \quad \rightarrow \quad U_0 \ll \frac{\hbar^2}{mR^2}, \quad (359)$$

получается результат

$$f_0 \approx \frac{k_1^2 R^3}{3} = \frac{2mU_0 R^3}{3\hbar^2}, \quad (360)$$

согласующийся с борновским приближением. Действительно, для медленных частиц в выражении для борновской амплитуды рассеяния

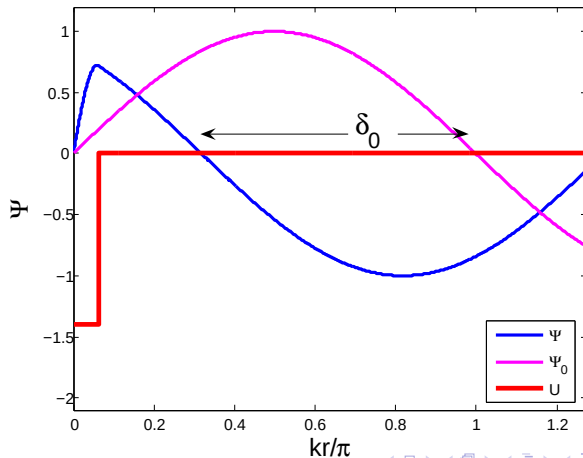
$$f_B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} U(r) d^3r \quad (361)$$

можно заменить экспоненту на единицу, поскольку $qr \ll 1$, и получается такой же результат

$$f_B = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^R (-U_0) 4\pi r^2 dr = \frac{2mU_0 R^3}{3\hbar^2}. \quad (362)$$

Рассеяние медленных частиц.

Фаза рассеяния δ_0 . Показаны волновые функции в отсутствие потенциала Ψ_0 и для притягивающего потенциала Ψ .



Рассеяние медленных частиц.

При увеличении глубины ямы фаза рассеяния растет, а с ней растет также и сечение рассеяния

$$\sigma = 4\pi |f_0|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0. \quad (363)$$

Максимум сечения рассеяния

$$\sigma_{\max} = \frac{4\pi}{k^2} \quad (364)$$

достигается при $\delta_0 = \pi/2$. Как следует из точной формулы

$$\tan(kR + \delta_0) = \frac{k}{k_1} \tan(k_1 R) \quad (365)$$

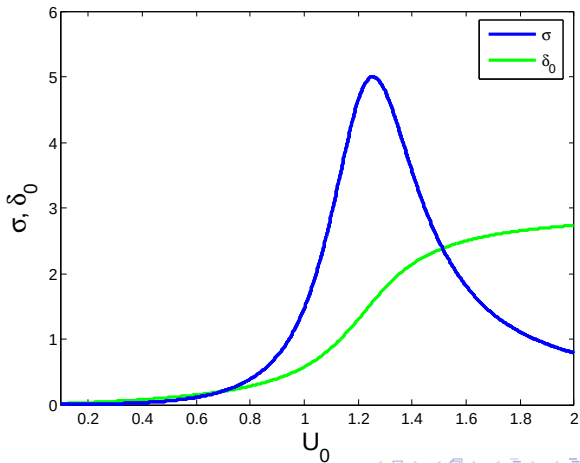
это соответствует соотношению

$$k_1 R = \frac{R}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \approx \pi/2, \quad \rightarrow \quad U_0 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mR^2}, \quad (366)$$

когда для рассеиваемой частицы появляется связанное состояние в потенциальной яме.

Рассеяние медленных частиц.

Зависимость сечения рассеяния σ и фазы рассеяния δ_0 от глубины потенциальной ямы U_0 .



Рассеяние медленных частиц.

Резонансное рассеяние, наблюдаемое при углублении потенциальной ямы и появлении связанного состояния.

Рассеяние медленных частиц.

При дальнейшем увеличении глубины ямы фаза рассеяния продолжает расти и когда $\delta \rightarrow \pi$ сечение рассеяния стремится к нулю

$$\sigma = 4\pi |f_0|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \Big|_{\delta_0 \rightarrow \pi} \rightarrow 0. \quad (367)$$

Из формулы

$$\tan(kR + \delta_0) \Big|_{\delta_0 \rightarrow \pi} \approx kR = \frac{k}{k_1} \tan(k_1 R) \quad (368)$$

следует, что это соответствует условию

$$\tan(k_1 R) \approx k_1 R. \quad (369)$$

Этот явление называется эффектом Рамзауэра и наблюдается экспериментально при рассеянии медленных частиц.

Рассеяние медленных частиц.

Пример 3. Рассеяние на отталкивающем потенциале

$$U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R \\ 0, & r > R. \end{cases} \quad (370)$$

В области $r < R$ конечное в начале координат решение уравнения Шредингера теперь имеет вид

$$\psi_1 = \frac{A(e^{k_1 r} - e^{-k_1 r})}{2r} \equiv \frac{A \sinh(k_1 r)}{r}, \quad (371)$$

где

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \approx \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mU_0}. \quad (372)$$

В области $r > R$ решение уравнения Шредингера имеет по-прежнему вид

$$\psi_2 = \frac{B \sin(kr + \delta_0)}{r}. \quad (373)$$

Рассеяние медленных частиц.

Из условия непрерывности волновых функций и их первых производных на границе $r = R$ получаем

$$\tan(kR + \delta_0) = \frac{k}{k_1} \tanh(k_1 R). \quad (374)$$

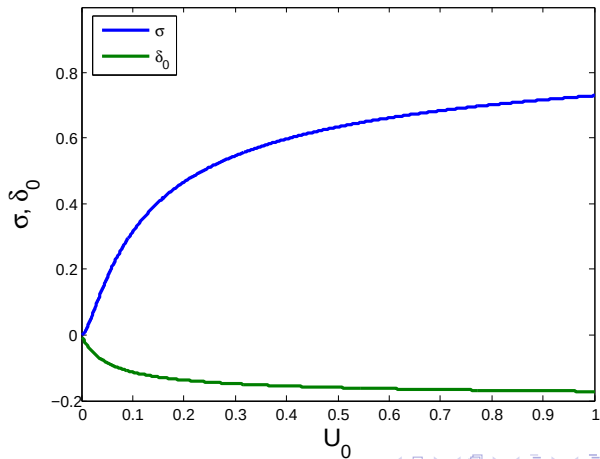
Фаза рассеяния отрицательна и уменьшается при увеличении высоты потенциального горба U_0 , сечение рассеяния σ монотонно растет. Предельное значение сечения рассеяния равно

$$\sigma \Big|_{U_0 \rightarrow \infty} = 4\pi R^2. \quad (375)$$

Величина сечения рассеяния медленных частиц в случае отталкивающего потенциала заметно меньше сечения рассеяния вблизи резонанса в случае потенциала притяжения (364), поскольку $kR \ll 1$.

Рассеяние медленных частиц.

Зависимость сечения рассеяния σ и фазы рассеяния δ_0 от глубины потенциальной ямы U_0 .



Рассеяние медленных частиц.

Поведение волновой функции и сечения рассеяния, наблюдаемое при увеличении высоты горба потенциала отталкивания.

Рассеяние медленных частиц.

"Выталкивание" волновой функции Ψ из области потенциала отталкивания.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 9 Рассеяние тождественных частиц.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Рассеяние тождественных частиц.

В квантовой механике все частицы одного типа абсолютно неразличимы (тождественны) и принадлежат одному из двух классов – фермионам, волновая функция которых меняет знак при перестановке двух частиц, и бозонам, волновая функция которых не меняется при перестановке.

Рассеяние тождественных частиц будем рассматривать в системе центра масс. Это эквивалентно рассеянию частицы с приведенной массой на потенциале взаимодействия двух частиц.

Рассеяние тождественных частиц.

Рассеяние бозонов.

В качестве первого примера рассмотрим рассеяние двух частиц с нулевым спином $S = 0$ (например α -частиц с кулоновским взаимодействием). Амплитуду рассеяния одной частицы на угол θ кулоновским потенциалом обозначим $f(\theta)$. В системе центра масс частицы как до так и после рассеяния летят в противоположных направлениях. Поэтому в детектор, расположенный под углом θ может прилететь либо одна частица, налетающая слева и рассеянная под углом θ , либо другая частица, налетающая справа и рассеянная под углом $\pi - \theta$.

Рассеяние тождественных частиц.

В силу тождественности частиц мы не можем различить какая именно частица попала в детектор и согласно правилам квантовой механики для бозонов амплитуды этих альтернативных возможностей должны складываться

$$F_{\text{бозон}} = f(\theta) + f(\pi - \theta). \quad (376)$$

Соответственно, дифференциальное сечение рассеяния равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2. \quad (377)$$

Рассеяние тождественных частиц.

Рассеяние тождественных частиц. В принципе нельзя определить какая именно частица попала в детектор.

Рассеяние тождественных частиц.

Для различных (не тождественных) частиц, дифференциальное сечение рассеяния равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2. \quad (378)$$

В частности, сечение рассеяния тождественных бозонов на угол $\theta = \pi/2$

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\theta=\pi/2} = 4|f(\theta = \pi/2)|^2 \quad (379)$$

в два раза превышает сечение рассеяния различных частиц (в этом случае мы в принципе можем определить какая именно частица попала в детектор и поэтому складываются вероятности, а не амплитуды.)

Рассеяние тождественных частиц.

Рассеяние различных (не тождественных) частиц. В принципе можно определить какая именно частица попала в детектор.

Рассеяние тождественных частиц.

S=1. Рассмотрим рассеяние частиц со спином 1. В этом случае у частиц есть внутренние степени свободы и их можно различить, если квантовые числа проекций спина разные. Тогда сечение рассеяния неполяризованных частиц равно

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{непол}} = \frac{1}{3} |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{2}{3} (|f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2). \quad (380)$$

Множитель $1/3$ перед первым членом есть вероятность, что проекции спинов сталкивающихся частиц одинаковы. Множитель $2/3$ перед вторым членом есть вероятность, что проекции спинов сталкивающихся частиц разные.

Рассеяние тождественных частиц.

Рассеяние фермионов. Рассмотрим рассеяние двух частиц со спином $S = 1/2$, например электронов. Опять в силу тождественности частиц мы не можем различить какой именно электрон попал в детектор, если проекции спинов электронов одинаковы. Однако поскольку электроны являются фермионами, согласно правилам квантовой механики амплитуды этих альтернативных возможностей должны вычитаться

$$F_{\text{ферм}} = f(\theta) - f(\pi - \theta). \quad (381)$$

Соответственно, дифференциальное сечение рассеяния электронов с одинаковыми проекциями спинов равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2. \quad (382)$$

В частности, сечение рассеяния на угол $\theta = \pi/2$

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\theta=\pi/2} = 0. \quad (383)$$

Рассеяние тождественных частиц.

Если проекции спинов электронов разные, мы можем различить какой именно электрон попал в детектор и суммируются вероятности попасть в детектор одного или другого электрона. Таким образом сечение рассеяния неполяризованных электронов друг на друге равно

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{2}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{2}|f(\theta)|^2 + \frac{1}{2}|f(\pi - \theta)|^2 = \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{1}{2}(f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)).\end{aligned}\quad (384)$$

Учтено, что вероятность совпадения (не совпадения) проекций спинов двух электронов равна $1/2$.

Рассеяние тождественных частиц.

Рассеяние неполяризованных электронов можно рассмотреть и по-другому. Полный спин системы из двух электронов равен либо $S = 1$, либо $S = 0$.

Состояние со спином единица является четными относительно перестановки частиц

$$|\psi\rangle_1 = |++\rangle, \quad |\psi\rangle_0 = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\psi\rangle_{-1} = |--\rangle \quad (385)$$

с проекциями полного спина $S_z = +1, S_z = 0, S_z = -1$. Тогда, поскольку электроны являются фермионами и их полная волновая функция должна быть нечетной относительно перестановки частиц, пространственная часть волновой функции должна быть нечетной, то есть

$$F_{S=1} = f(\theta) - f(\pi - \theta). \quad (386)$$

Рассеяние тождественных частиц.

Состояние со спином ноль является нечетным относительно перестановки частиц

$$|\psi\rangle_{00} = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (387)$$

Тогда пространственная часть волновой функции должна быть четной, то есть

$$F_{S=0} = f(\theta) + f(\pi - \theta). \quad (388)$$

Рассеяние тождественных частиц.

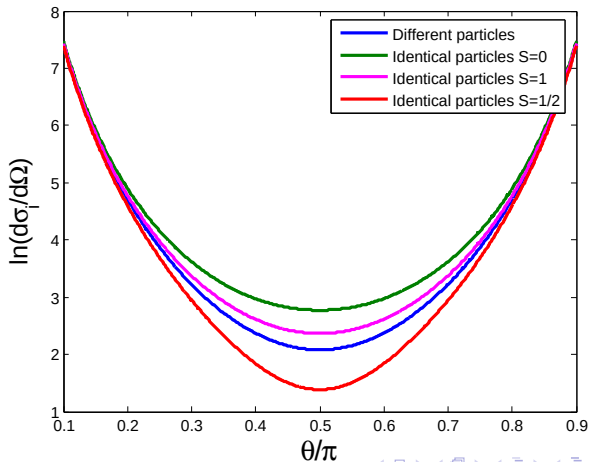
Вероятность, что два электрона будут иметь суммарный спин $S = 1$ равна $3/4$, вероятность, что два электрона будут иметь суммарный спин $S = 0$ равна $1/4$. Тогда сечение рассеяния неполяризованных электронов равно

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \frac{1}{2}(f(\theta)f^*(\pi - \theta) + f^*(\theta)f(\pi - \theta)).\end{aligned}\quad (389)$$

и совпадает с полученным выше другим способом.

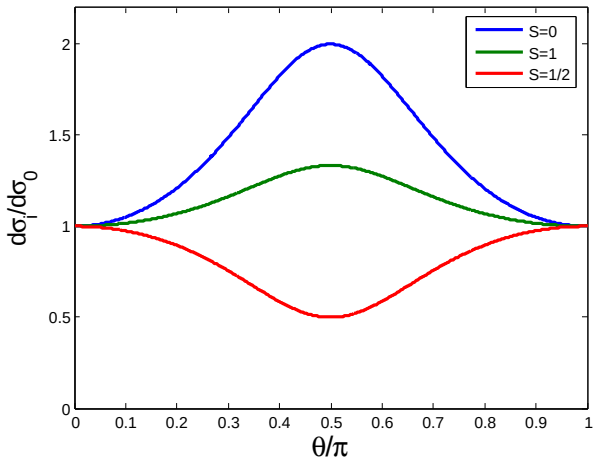
Рассеяние тождественных частиц.

Логарифмическая зависимость дифференциального сечения рассеяния от угла для различных и тождественных частиц со спином $S = 0$, $S = 1$, $S = 1/2$.



Рассеяние тождественных частиц.

Зависимость отношения дифференциальных сечений рассеяния тождественных частиц со спином $S = 0$, $S = 1$, $S = 1/2$ к дифференциальному сечению рассеяния различных частиц от угла рассеяния.



Рассеяние частиц со спином.

Рассмотрим другой тип задач, когда рассеиваются разные частицы, но потенциал взаимодействия зависит от спинов частиц, что имеет место например при рассеянии протонов и нейтронов. Потенциал взаимодействия нейтрона и протона является короткодействующим и может быть представлен в виде

$$U = A(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2) \frac{e^{-\mu r}}{r}. \quad (390)$$

Амплитуда рассеяния в борновском приближении равна

$$f(q) = A(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2) \left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \int \frac{e^{-\mu r - i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{r} d^3r. \quad (391)$$

Вычисляя интеграл, имеем

$$f(q) = -A(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2) \frac{2m}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)}. \quad (392)$$

Рассеяние частиц со спином.

Выразим скалярное произведение спинов протона и нейтрона через суммарный спин

$$\vec{S} = (\vec{s}_1 + \vec{s}_2) \rightarrow \vec{S}^2 = S(S+1) = (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)^2 = \vec{s}_1^2 + \vec{s}_2^2 + 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2, \quad (393)$$

откуда

$$\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{S(S+1)}{2} - \frac{3}{4}. \quad (394)$$

Амплитуда рассеяния в состоянии с суммарным спином ноль

$$f_0 = \frac{3mA}{2\hbar^2(q^2 + \mu^2)}, \quad (395)$$

амплитуда рассеяния в состоянии с суммарным спином единица

$$f_1 = -\frac{mA}{2\hbar^2(q^2 + \mu^2)}. \quad (396)$$

Рассеяние частиц со спином.

Найдем теперь вероятность переворота спина нейтрона, если сначала он находился в состоянии с проекцией $s_z = +1/2$, при рассеянии на протоне с проекцией спина $s_z = -1/2$. Начальное состояние спинов частиц можно представить в виде

$$|+n - p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{S=1} + \psi_{S=0}), \quad (397)$$

где

$$\psi_{S=1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+n - p\rangle + |-n + p\rangle), \quad \psi_{S=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+n - p\rangle - |-n + p\rangle) \quad (398)$$

Рассеяние частиц со спином.

Конечное состояние после рассеяния имеет вид

$$\begin{aligned}\psi_f &= \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{\sqrt{2}} (f_1 \psi_{S=1} + f_0 \psi_{S=0}) = \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \left(\frac{f_1 + f_0}{2} |+_n -_p\rangle + \frac{f_1 - f_0}{2} |-_n +_p\rangle \right)\end{aligned}\quad (399)$$

Тогда вероятность переворота спина равна

$$P_{+_n \rightarrow -_n} = \frac{|f_1 - f_0|^2}{|f_1 - f_0|^2 + |f_1 + f_0|^2} = \frac{4}{5}.\quad (400)$$

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 10 Излучение. Квантование электромагнитного поля.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Квантование электромагнитного поля.

Электромагнитное поле в вакууме (в отсутствии зарядов и токов) принято описывать с помощью векторного потенциала $\vec{A}(\vec{r}, t)$, полагая равным нулю скалярный потенциал $\phi(\vec{r}, t) = 0$. Электрическое и магнитное поле тогда выражаются так

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad \vec{B} = [\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t)]. \quad (401)$$

На векторный потенциал накладывается дополнительное ограничение

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0, \quad (402)$$

выражающее поперечность электромагнитного поля. Для плоской волны

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (403)$$

получаем

$$\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \sim \vec{k} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) = 0. \quad (404)$$

Квантование электромагнитного поля.

Из уравнения Максвелла

$$[\vec{\nabla} \times \vec{B}] = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (405)$$

следует, с учетом $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, волновое уравнение

$$\Delta \vec{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2}. \quad (406)$$

Для монохроматической волны

$$\vec{A} \sim e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega t} \quad (407)$$

получаем закон дисперсии

$$\omega = kc. \quad (408)$$

Квантование электромагнитного поля.

Удобно рассматривать электромагнитное поле в большом, но конечном объеме в виде ящика со сторонами L_x, L_y, L_z . Разложим векторный потенциал в ряд Фурье

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (409)$$

и примем периодические граничные условия

$$k_x L_x = 2\pi n_x, \quad k_y L_y = 2\pi n_y, \quad k_z L_z = 2\pi n_z, \quad (410)$$

где n_x, n_y, n_z – положительные и отрицательные целые числа.

Поскольку векторный потенциал является вещественной величиной

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \vec{A}^*(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}}^*(t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (411)$$

для фурье-компонент должно выполняться соотношение

$$\vec{A}_{\vec{k}}^* = \vec{A}_{-\vec{k}}. \quad (412)$$

Квантование электромагнитного поля.

Выразим энергию (она же функция Гамильтона) электромагнитного поля, которая как известно равна

$$H = \int_V \left(\frac{\vec{E}^2}{8\pi} + \frac{\vec{B}^2}{8\pi} \right) d^3r, \quad (413)$$

через фурье-компоненты векторного потенциала. Имеем

$$\int_V \frac{\vec{E}^2}{8\pi} d^3r = \frac{1}{8\pi c^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{p}} \dot{\vec{A}}_{\vec{k}} \cdot \dot{\vec{A}}_{\vec{p}} \int_V e^{i(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{r}} d^3r. \quad (414)$$

Вычислим интеграл по x , используя условия (410) :

$$\int_0^{L_x} e^{i(k_x+p_x)x} dx = \int_0^{L_x} e^{2\pi i(n_x+m_x)x/L_x} dx. \quad (415)$$

Квантование электромагнитного поля.

Если $n_x = -m_x (k_x = -p_x)$, то интеграл равен L_x , иначе он равен нулю. Таким образом

$$\int_V e^{i(\vec{k}+\vec{p})\cdot\vec{r}} d^3r = V\Delta(\vec{k}+\vec{p}), \quad (416)$$

где Δ – символ Кронекера. Тогда

$$\int_V \frac{\vec{E}^2}{8\pi} d^3r = \frac{1}{8\pi c^2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{p}} \dot{\vec{A}}_{\vec{k}} \cdot \dot{\vec{A}}_{\vec{p}} V\Delta(\vec{k}+\vec{p}) = \frac{V}{8\pi c^2} \sum_{\vec{k}} \dot{\vec{A}}_{\vec{k}} \cdot \dot{\vec{A}}_{\vec{k}}^*. \quad (417)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} \int_V \frac{\vec{B}^2}{8\pi} d^3r &= \frac{1}{8\pi} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{p}} i[\vec{k}, \vec{A}_{\vec{k}}] \cdot (i)[\vec{p}, \vec{A}_{\vec{p}}] V\Delta(\vec{k}+\vec{p}) = \\ &= \frac{V}{8\pi} \sum_{\vec{k}} k^2 \vec{A}_{\vec{k}} \cdot \vec{A}_{\vec{k}}^*. \end{aligned} \quad (418)$$

Квантование электромагнитного поля.

Сравнивая полученное выражение для энергии электромагнитного поля

$$H = \sum_{\vec{k}} \left(\frac{V}{8\pi c^2} \dot{\vec{A}}_{\vec{k}} \cdot \dot{\vec{A}}_{\vec{k}}^* + \frac{V k^2}{8\pi} \vec{A}_{\vec{k}} \cdot \vec{A}_{\vec{k}}^* \right) \quad (419)$$

с энергией гармонического осциллятора

$$H' = \left(\frac{m}{2} \dot{Q}^2 + \frac{m\omega^2}{2} Q^2 \right), \quad (420)$$

приходим к заключению, электромагнитное поле можно рассматривать как набор независимых гармонических осцилляторов с массой m и частотой ω_k

$$m = \frac{V}{4\pi c^2}, \quad \omega_k = ck. \quad (421)$$

Квантование электромагнитного поля.

Переход к квантовому описанию гармонического осциллятора осуществляется (лекция 3-1) введением операторов $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (422)$$

Аналогично для оператора векторного потенциала получаем

$$\hat{\vec{A}}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{k}}}} \vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \left(\hat{a}_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_{\vec{k}} t} + \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega_{\vec{k}} t} \right), \quad (423)$$

где введен вектор поляризации $\vec{e}_{\vec{k}, \lambda}$ с двумя независимыми направлениями поляризации λ . Гамильтониан электромагнитного поля равен

$$\hat{H}_r = \sum_{\vec{k}, \lambda} \hbar\omega_{\vec{k}} \left(\hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (424)$$

Квантование электромагнитного поля.

Операторы электрического $\hat{\vec{E}}$ и магнитного $\hat{\vec{B}}$ полей равны

$$\hat{\vec{E}}(\vec{r}, t) = -i \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{\vec{k}}}{V}} \vec{e}_{\vec{k}, \lambda} \left(\hat{a}_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_{\vec{k}} t} - \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega_{\vec{k}} t} \right), \quad (425)$$

$$\hat{\vec{B}}(\vec{r}, t) = -i \sum_{\vec{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\vec{k}}}} [\vec{k}, \vec{e}_{\vec{k}, \lambda}] \left(\hat{a}_{\vec{k}, \lambda} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} - i\omega_{\vec{k}} t} - \hat{a}_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} + i\omega_{\vec{k}} t} \right). \quad (426)$$

Произвольное электромагнитное поле излучения можно представить как набор квантов, фотонов. В вакуумном состоянии фотонов нет и средние значения полей равны нулю. Однако среднее значение энергии не равно нулю – есть флуктуации полей. Эти флуктуации приводят к наблюдаемым следствиям – лэмбовскому сдвигу атомных уровней энергии и силам Казимира.

Квантование электромагнитного поля.

Рассмотрим задачу о спектре теплового излучения “черного тела” – задачи в которой впервые появилась постоянная Планка. Под “черным телом” понимается абсолютно поглощающее тело, примером которого может служить например полость с небольшим отверстием.

Подсчитаем число волн в ящике размером $L_x \times L_y \times L_z$ волновые вектора которых лежат в интервале

$$(k_x, k_x + dk_x), (k_y, k_y + dk_y), (k_z, k_z + dk_z). \quad (427)$$

Используя периодические граничные условия (410), получаем

$$dN = \frac{dk_x dk_y dk_z L_x L_y L_z}{(2\pi)^3}. \quad (428)$$

Квантование электромагнитного поля.

Если стенки ящика имеют температуру T и излучение находится в равновесии (атомы в стенках ящика испускают и поглощают фотоны), то согласно статистической механике вероятность, что в полости будет находиться n фотонов с частотой ω , пропорциональна

$$P(n) = \frac{1}{Z} e^{-n\hbar\omega/T}, \quad (429)$$

где температура измеряется в энергетических единицах. Температуре $T = 11606^\circ K$ соответствует энергия 1 эВ. Нормировочный множитель

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\omega/T} = \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega/T}} \quad (430)$$

находится из условия

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(n) = 1. \quad (431)$$

Квантование электромагнитного поля.

Средняя энергия фотонов с частотой ω равна

$$\bar{e}(\omega) = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\omega/T} \langle n | \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\hbar\omega/T} n\hbar\omega. \quad (432)$$

Получаем

$$\bar{e}(\omega) = \frac{1}{Z} \frac{dZ}{d(1/T)} = \frac{d}{d(1/T)} \ln Z = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1}. \quad (433)$$

Квантование электромагнитного поля.

Тогда средняя энергия излучения в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$ дается умножением полученного результата на число колебаний в этом интервале частот (с учетом двух возможных направлений поляризации)

$$d\bar{E}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} 2 \frac{4\pi k^2 dk V}{(2\pi)^3} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \frac{V\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}, \quad (434)$$

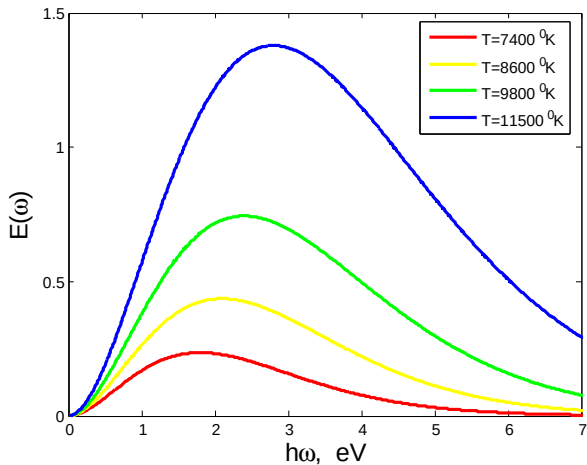
где перешли от декартовых координат в пространстве волновых векторов к сферическим

$$dk_x dk_y dk_z \rightarrow 4\pi k^2 dk \quad (435)$$

и использовали закон дисперсии $\omega = kc$.

Квантование электромагнитного поля.

Спектр излучения черного тела при различных температурах.



Квантование электромагнитного поля.

Максимум в спектре излучения

$$I(\omega) = \frac{d\bar{E}(\omega)}{d\omega} = \frac{V}{\pi^2} \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3 \frac{x^3}{e^x - 1}, \quad (436)$$

где введено обозначение

$$x \equiv \frac{\hbar\omega}{T}, \quad (437)$$

находим из условия

$$\frac{dI(x)}{dx} = 0, \quad \rightarrow \quad 3(e^x - 1) = xe^x. \quad (438)$$

Численное решение этого уравнения дает

$$\hbar\omega_{\max} \approx 2.82T. \quad (439)$$

Квантование электромагнитного поля.

Полная энергия излучения

$$\bar{E} = \frac{VT^4}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} = \frac{\pi^2 VT^4}{15 \hbar^3 c^3} \quad (440)$$

имеет конечное значение – нет “ультрафиолетовой катастрофы”, предсказываемой классической физикой. Полное среднее число фотонов равно

$$\bar{N} = \frac{VT^3}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} \approx 0.244 V \left(\frac{T}{\hbar c} \right)^3. \quad (441)$$

Ниже представлена наглядная картина достижения (установления) теплового равновесного спектра излучения. Фотоны различной частоты условно изображаются в виде шариков различного цвета. Излучение и поглощение фотонов происходит только на дне ящика, другие стенки ящика сделаны зеркальными.

Квантование электромагнитного поля.

Установление равновесного спектра излучения черного тела. Число фотонов флуктуирует даже после достижения равновесия.

Квантование электромагнитного поля.

Установление равновесного спектра излучения черного тела при более высокой температуре. Число фотонов и их средняя частота (энергия) больше.

Квантование электромагнитного поля.

Установление равновесного спектра излучения черного тела при другом начальном условии.

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 11 Излучение. Взаимодействие заряженных частиц и электромагнитного поля.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Взаимодействие заряженных частиц и электромагнитного поля.

Гамильтониан заряженных частиц без спина в электромагнитном поле равен

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}}/c)^2}{2m}. \quad (442)$$

Константой взаимодействия заряженных частиц и электромагнитного поля является постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \ll 1, \quad (443)$$

поэтому взаимодействие можно описывать по теории возмущений. Основной вклад во взаимодействие дает член

$$\hat{H}_1 = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{A}}. \quad (444)$$

Взаимодействие заряженных частиц и электромагнитного поля.

Волновая функция в нулевом приближении есть произведение волновой функции заряженной частицы (например электрона в атоме) и волновой функции фотона

$$|\Psi\rangle_0 = \psi_f^a(r)|\dots, n_{\mathbf{k}\lambda}, \dots\rangle, \quad (445)$$

где $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0, 1, 2, \dots$ число фотонов с волновым вектором $\mathbf{k}$ и поляризацией λ . Оператор $\hat{\mathbf{p}}$ действует на волновую функцию заряженной частицы, оператор $\hat{\mathbf{A}}$ действует на волновую функцию фотона.

Дипольное излучение.

Рассмотрим в качестве примера излучение фотона атомом. Первоначально атом находится в возбужденном состоянии, а фотонов нет. Волновая функция начального состояния равна

$$|\Psi_i\rangle = \psi_i^a(r)|0\rangle. \quad (446)$$

Волновая функция конечного состояния – атом перешел в основное состояние, испустив фотон с импульсом $\mathbf{k}$ и поляризацией λ – равна

$$|\Psi_f\rangle = \psi_f^a(r)|1_{\mathbf{k}\lambda}, 0, \dots\rangle. \quad (447)$$

Найдем вероятность перехода с испусканием фотона в единицу времени, используя теорию возмущений

$$d\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 d\nu, \quad (448)$$

где $d\nu$ плотность числа состояний испущенного фотона.

Дипольное излучение.

Матричный элемент перехода равен

$$U_{fi} = -\frac{e}{mc} \langle 1_{\mathbf{k}\lambda}; \psi_f^a | \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | 0; \psi_i^a \rangle. \quad (449)$$

Ненулевой вклад от оператора $\hat{\mathbf{A}}$ дает только один член, поскольку

$$\langle 1_{\mathbf{k}\lambda}, 0, \dots | \alpha_{\mathbf{k}'\lambda'} \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} | 0 \rangle = \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda, \lambda'} \alpha_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (450)$$

тогда как

$$\langle 1_{\mathbf{k}\lambda}, 0, \dots | \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'} | 0 \rangle = 0. \quad (451)$$

Тогда получим

$$U_{fi} = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \langle \psi_f^a | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \psi_i^a \rangle. \quad (452)$$

Дипольное излучение.

Обозначим начальную энергию атома ε_2 , конечную энергию атома ε_1 . Тогда

$$\delta(E_f - E_i) = \delta(\varepsilon_1 + \hbar\omega - \varepsilon_2) = \frac{1}{\hbar}\delta(\omega - \omega_{21}), \quad (453)$$

где ω – частота излученного фотона, а

$$\omega_{21} = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\hbar} \quad (454)$$

– частота атомного перехода. В результате число состояний при излучении фотона с определенной поляризацией в телесный угол $d\Omega$ равно

$$d\nu = \int \delta(E_f - E_i) \frac{V k^2 dk d\Omega}{(2\pi)^3} = \frac{V \omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}. \quad (455)$$

Дипольное излучение.

Вероятность излучения в единицу времени принимает вид

$$d\dot{W} = \frac{e^2 \omega_{21}}{2\pi \hbar m^2 c^3} \left| \langle \psi_f^a | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | \psi_i^a \rangle \right|^2 d\Omega. \quad (456)$$

При вычислении атомного матричного элемента обычно используется дипольное приближение, когда экспоненту $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ заменяют единицей, поскольку

$$kr \sim \frac{\omega a}{c} \sim \frac{me^4}{c\hbar^3} \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \ll 1. \quad (457)$$

Используя соотношение

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{im}{\hbar} [\hat{H}_a, \mathbf{r}], \quad (458)$$

Дипольное излучение.

матричный элемент импульса можно записать в виде

$$\begin{aligned}\langle \psi_f^a | \hat{\mathbf{p}} | \psi_i^a \rangle &= \frac{im}{\hbar} \langle \psi_f^a | \hat{H}_a \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H}_a | \psi_i^a \rangle = \\ &= -im \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\hbar} \langle \psi_f^a | \mathbf{r} | \psi_i^a \rangle = -im\omega_{21} \langle \psi_f^a | \mathbf{r} | \psi_i^a \rangle.\end{aligned}\quad (459)$$

Вводя обозначение для матричного элемента дипольного момента

$$\mathbf{d} \equiv e\mathbf{r}$$

$$\mathbf{d}_{fi} \equiv e \langle \psi_f^a | \mathbf{r} | \psi_i^a \rangle, \quad (460)$$

получаем вероятность излучения в единицу времени в телесный угол $d\Omega$

$$d\dot{W} = \frac{\omega_{21}^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{d}_{fi}|^2 d\Omega. \quad (461)$$

Дипольное излучение.

Если матричный элемент дипольного момента отличен от нуля, то говорят что данный переход **разрешен**, в противном случае – **запрещен**. Какие переходы разрешены, а какие запрещены устанавливают **правила отбора**. Поскольку величина дипольного момента **er** меняет знак при инверсии (нечетная функция), то разрешены в дипольном приближении только переходы между состояниями с противоположной четностью, Угловую зависимость дипольного момента можно выразить через сферические функции

$$\begin{aligned}d_z \sim z \sim \cos \theta \sim Y_{10}, \quad d_x \sim \cos \phi \sin \theta \sim (Y_{1,+1} - Y_{1,-1}), \\ d_y \sim \sin \phi \sin \theta \sim (Y_{1,+1} + Y_{1,-1}).\end{aligned}\tag{462}$$

Это означает, что фотон можно рассматривать как частицу с единичным угловым моментом импульса.

Дипольное излучение.

Используя закон сложения моментов импульса, получаем, что момент импульса конечного состояния может отличаться от момента импульса начального состояния на единицу (совпадать не могут – четность должна быть разной). Тогда матричный элемент дипольного перехода отличен от нуля если орбитальные моменты l начального и конечного состояния отличаются на единицу. Проекции орбитального момента m могут отличаться на либо на единицу, либо совпадать (четность состояния определяется только l). Таким образом получаются правила отбора для дипольного перехода

$$\Delta l \equiv l_f - l_i = \pm 1, \quad \Delta m \equiv m_f - m_i = 0, \pm 1. \quad (463)$$

Дипольное излучение.

В качестве примера рассмотрим излучение атомом водорода при переходе из возбужденного состояния $2p$ в основное состояние $1s$ (переход $2s \rightarrow 1s$ запрещен). Сначала найдем скорость перехода из начального состояния

$$\Psi_{n=2,l=1,m=0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \frac{r}{\sqrt{24}a^5} e^{-r/2a}. \quad (464)$$

в конечное состояние

$$\Psi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \quad (465)$$

то есть переход с $\Delta m = 0$. В этом случае отличен от нуля только матричный элемент z -компоненты дипольного момента

$$\begin{aligned} (d_z)_{fi} &= e \int \Psi_{n=1,l=0,m=0} z \Psi_{n=2,l=1,m=0} d^3r = \\ &= \frac{e}{4\pi\sqrt{2}a^4} \int_{-1}^{+1} (\cos \theta)^2 2\pi d \cos \theta \int_0^\infty r^4 e^{-3r/2a} dr = ea \frac{128\sqrt{2}}{243}. \end{aligned} \quad (466)$$

Дипольное излучение.

Вероятность излучения в единицу времени фотона с волновым вектором $\mathbf{k}$ и поляризацией λ в телесный угол $d\Omega$ равна

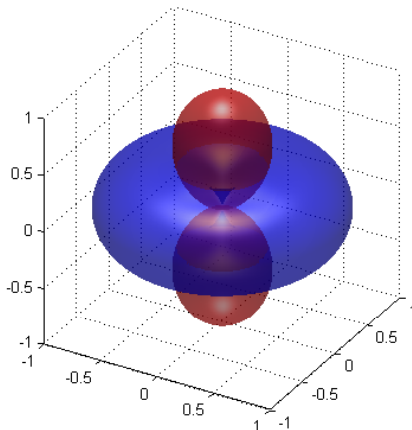
$$d\dot{W} = \frac{\omega_{21}^3}{2\pi\hbar c^3} |(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})_z (\mathbf{d}_{fi})_z|^2 d\Omega. \quad (467)$$

Теперь необходимо просуммировать по двум возможным состояниям поляризации. Удобно один вектор поляризации выбрать перпендикулярным векторам $\mathbf{d}$ и $\mathbf{k}$, а другой – лежащим в плоскости векторов $\mathbf{d}$ и $\mathbf{k}$. Тогда угловое распределение излученных фотонов определяется величиной

$$|(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})_z (\mathbf{d}_{fi})_z|^2 = \sin^2 \theta |(\mathbf{d}_{fi})_z|^2. \quad (468)$$

Дипольное излучение.

Угловое распределение излучения (синий цвет) при переходе с $\Delta m = 0$. Показано также угловое распределение плотности электронного заряда (красный цвет) в возбужденном состоянии.



Дипольное излучение.

Угловое распределение излучения (синий цвет) при переходе с $\Delta m = 0$. Показано также угловое распределение плотности электронного заряда (красный цвет) в возбужденном состоянии.

Дипольное излучение.

Теперь найдем скорость перехода из начального состояния

$$\Psi_{n=2,l=1,m=+1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}a^5} \sin\theta e^{i\phi} r e^{-r/2a}. \quad (469)$$

в конечное состояние

$$\Psi_{n=1,l=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi}a^3} e^{-r/a}, \quad (470)$$

то есть переход с $\Delta m = -1$. В этом случае матричный элемент z -компоненты дипольного момента равен нулю, поскольку

$$\int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi = 0. \quad (471)$$

Отличны от нуля компоненты $(\mathbf{d}_{fi})_x$, $(\mathbf{d}_{fi})_y$.

Дипольное излучение.

$$(d_x)_{fi} = e \int \Psi_{n=1,l=0,m=0}^* \Psi_{n=2,l=1,m=+1} d^3r =$$
$$= -\frac{e}{8\pi a^4} \int_{-1}^{+1} (\sin \theta)^2 d \cos \theta \int_0^{2\pi} (\cos \phi)^2 d\phi \int_0^{\infty} r^4 e^{-3r/2a} dr = -ea \frac{128}{243}. \quad (472)$$

Учтено, что $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$ и

$$\int_0^{2\pi} \cos \phi \sin \phi d\phi = 0. \quad (473)$$

Аналогично $(\mathbf{d}_{fi})_y = i(\mathbf{d}_{fi})_x$. Чтобы просуммировать по поляризациям выберем один вектор поляризации в плоскости xy

$$\mathbf{e}_1 = (\sin \phi, -\cos \phi, 0), \quad (474)$$

а другой, ортогональный первому, в плоскости, проходящей через ось z и вектор $\mathbf{k}$

$$\mathbf{e}_2 = (-\cos \theta \cos \phi, -\cos \theta \sin \phi, \sin \theta). \quad (475)$$

Дипольное излучение.

Легко проверить ортогональность векторов поляризации вектору $\mathbf{k}$

$$\mathbf{k} = k(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta). \quad (476)$$

Тогда

$$|(\mathbf{e}_1)_x(\mathbf{d}_{fi})_x + (\mathbf{e}_1)_y(\mathbf{d}_{fi})_y|^2 = |(\mathbf{d}_{fi})_x|^2, \quad (477)$$

$$|(\mathbf{e}_2)_x(\mathbf{d}_{fi})_x + (\mathbf{e}_2)_y(\mathbf{d}_{fi})_y|^2 = \cos^2 \theta |(\mathbf{d}_{fi})_x|^2. \quad (478)$$

В итоге угловое распределение излученных фотонов при переходе с $\Delta m = -1$ определяется величиной

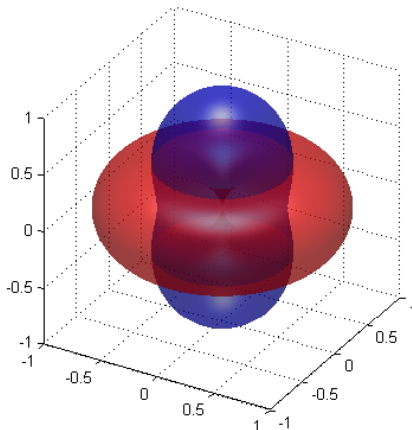
$$(1 + \cos^2 \theta) |(\mathbf{d}_{fi})_x|^2 = \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} |(\mathbf{d}_{fi})_z|^2. \quad (479)$$

Очевидно, что точно такой же результат получается для перехода с $\Delta m = +1$, то есть из начального состояния

$$\Psi_{n=2, l=1, m=-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}a^5} \sin \theta e^{-i\phi} r e^{-r/2a}. \quad (480)$$

Дипольное излучение.

Угловое распределение излучения (синий цвет) при переходе с $\Delta m = \pm 1$. Показано также угловое распределение плотности электронного заряда (красный цвет) в возбужденном состоянии.



Дипольное излучение.

Угловое распределение излучения (синий цвет) при переходе с $\Delta m = \pm 1$. Показано также угловое распределение плотности электронного заряда (красный цвет) в возбужденном состоянии.

Дипольное излучение.

Полная вероятность излучения фотона в единицу времени получается интегрированием по телесному углу и равна

$$\dot{W} = \frac{\omega_{21}^3}{2\pi\hbar c^3} |(\mathbf{d}_{fi})_z|^2 \int_{-1}^{+1} \sin^2 \theta 2\pi d \cos \theta = \frac{4\omega_{21}^3}{3\hbar c^3} |(\mathbf{d}_{fi})_z|^2. \quad (481)$$

Оценка для атомных переходов дает

$$\begin{aligned} \dot{W} &\sim \frac{\omega^3 e^2 a^2}{\hbar c^3} \sim \frac{e^6 e^2 a^2}{\hbar^4 a^3 c^3} \sim \\ &\sim \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{e^2}{\hbar a} \sim \left(\frac{1}{137}\right)^3 \frac{1 \text{ эВ}}{10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{с}} \sim 10^9 \text{ 1/с}. \end{aligned} \quad (482)$$

Время жизни возбужденного состояния

$$\tau \sim \frac{1}{\dot{W}} \sim 10^{-9} \text{ с}. \quad (483)$$

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА-II

Лекция 12 Фотоэффект.

лектор: Образовский Е. Г.

30 марта 2016 г.

Фотоэффект.

Фотоэффект – ионизация атомов при поглощении фотона и он является основным процессом взаимодействия рентгеновского излучения с веществом.

Рассмотрим явление фотоэффекта для атома водорода.

Первоначально атом находится в основном состоянии, фотон с волновым вектором $\mathbf{k}$ и поляризацией λ . Волновая функция начального состояния равна

$$|\Psi_i\rangle = \psi_i^a(r)|1_{\mathbf{k}\lambda}, 0, \dots\rangle. \quad (484)$$

Конечное состояние – при поглощении фотона связанный в атоме водорода электрон стал свободным с импульсом $\mathbf{p}$. Волновая функция конечного состояния равна

$$|\Psi_f\rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}}. \quad (485)$$

Фотоэффект.

Найдем вероятность перехода с испусканием фотоэлектрона в единицу времени, используя теорию возмущений

$$d\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 d\nu, \quad (486)$$

где $d\nu$ плотность числа состояний фотоэлектрона.

Матричный элемент перехода равен

$$U_{fi} = -\frac{e}{mc} \langle 0; \psi_f^e | \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} | 1_{\mathbf{k}\lambda}; \psi_i^a \rangle. \quad (487)$$

Ненулевой вклад от оператора $\hat{\mathbf{A}}$ дает только один член, поскольку

$$\langle 0 | \alpha_{\mathbf{k}'\lambda'} \hat{a} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} | 1_{\mathbf{k}\lambda} \rangle = \Delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\lambda, \lambda'} \alpha_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (488)$$

тогда как

$$\langle 0 | \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger | 1_{\mathbf{k}\lambda} \rangle = 0. \quad (489)$$

Фотоэффект.

Тогда получим

$$U_{fi} = -\frac{e}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot \int e^{-i(\mathbf{p}/\hbar - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}} d^3 r. \quad (490)$$

Рассмотрим случай больших энергий фотона

$$\hbar\omega \gg I_0 \left(= \frac{me^4}{2\hbar^2} \right) \approx 13.6 \text{ эВ}, \quad (491)$$

однако

$$\hbar\omega \ll mc^2 \approx 0.5 \cdot 10^6 \text{ эВ}. \quad (492)$$

В этом случае

$$p \approx \sqrt{2m\hbar\omega} \gg \hbar k = \frac{\hbar\omega}{c}. \quad (493)$$

Фотоэффект.

Интеграл

$$I = \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \hat{\mathbf{p}} e^{-r/a} d^3r = -i\hbar \int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{-r/a} d^3r \quad (494)$$

вычисляем методом интегрирования по частям

$$\begin{aligned} I &= i\hbar \int e^{-r/a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} d^3r = \mathbf{p} \int_0^\infty e^{-r/a} \left(\frac{e^{ipr/\hbar} - e^{-ipr/\hbar}}{ipr/\hbar} \right) 2\pi r^2 dr = \\ &= -\frac{2\pi i\mathbf{p}}{p} \left[\frac{1}{(1/a - ip/\hbar)^2} - \frac{1}{(1/a + ip/\hbar)^2} \right] = \frac{8\pi a^3 \mathbf{p}}{(1 + p^2 a^2 / \hbar^2)^2}. \end{aligned} \quad (495)$$

Фотоэффект.

Квадрат матричного элемента равен

$$|U_{fi}|^2 = \frac{e^2}{m^2} \frac{2\hbar}{\omega V^2} \frac{(8\pi)^2 a^3}{(1 + p^2 a^2 / \hbar^2)^4} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})^2. \quad (496)$$

Число состояний электрона с импульсом p , вылетающего из атома в телесный угол $d\Omega$, равно

$$d\nu = \int \delta(E_f - \hbar\omega) \frac{V p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar^3)^3} = \frac{V m p d\Omega}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (497)$$

Дифференциальное сечение связано с вероятностью перехода соотношением

$$d\sigma = \frac{d\dot{W}}{j} = \frac{V d\dot{W}}{c}, \quad (498)$$

где j – плотность потока фотонов с нормировкой на один фотон в объеме V .

Фотоэффект.

В итоге получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{32e^2 a^3 p}{m\omega c \hbar^3} \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})^2}{(1 + p^2 a^2 / \hbar^2)^4} \quad (499)$$

Величина

$$\frac{p^2 a^2}{\hbar^2} = \frac{p^2 \hbar^4}{m^2 e^4} = \frac{p^2}{2m} \frac{2\hbar^2}{me^2} = \frac{p^2}{2ml_0} \gg 1. \quad (500)$$

Поэтому при высоких энергиях фотона ($\hbar\omega \gg l_0$) сечение фотоэффекта пропорционально

$$\sigma \sim \left(\frac{l_0}{\hbar\omega} \right)^{7/2}. \quad (501)$$

Поскольку $d\sigma/d\Omega \sim (\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda})^2$, фотоэлектроны вылетают преимущественно вдоль направления вектора поляризации фотона $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$ (соответственно перпендикулярно волновому вектору фотона) $\mathbf{k}$.