Поэтому полученное соотношение показывает, что энергия способной к распаду системы в некотором *квазистационарном* состоянии может быть определена лишь с точностью до величины порядка $\hbar/\tau$. Эту величину обычно называют *шириной* Γ уровня. Таким образом

$$\Gamma \sim \hbar/\tau. \tag{44,7}$$

§ 45. Потенциальная энергия как возмущение

Особого рассмотрения заслуживает случай, когда в качестве возмущения может рассматриваться полная потенциальная энергия частицы во внешнем поле. Невозмущенное уравнение Шредингера есть тогда уравнение свободного движения частицы

$$\Delta\psi^{(0)} + k^2\psi^{(0)} = 0, \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \tag{45,1}$$

и имеет решениями плоские волны. Энергетический спектр свободного движения непрерывен, так что мы имеем дело со своеобразным случаем теории возмущений в непрерывном спектре. Решение задачи удобнее получить здесь непосредственно, не прибегая к общим формулам.

Уравнение для поправки $\psi^{(1)}$ первого приближения к волновой функции гласит:

$$\Delta\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2mU}{\hbar^2}\psi^{(0)} \tag{45,2}$$

(U — потенциальная энергия). Решение этого уравнения, как известно из электродинамики, может быть написано в виде «запаздывающих потенциалов», т. е. в виде [1])

$$\begin{gathered}\psi^{(1)}(x, y, z) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \psi^{(0)}U(x', y', z')\, e^{ikr}\frac{dV'}{r},\\ dV' = dx'\,dy'\,dz', \quad r^2 = (x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2.\end{gathered} \tag{45,3}$$

Выясним, каким условиям должно удовлетворять поле U для того, чтобы его можно было рассматривать как возмущение. Условие применимости теории возмущений заключается в требовании $\psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$. Пусть a есть порядок величины размеров области пространства, в котором поле заметно отличается от нуля. Предположим сначала, что энергия частицы настолько мала, что ak меньше или порядка единицы. Тогда множитель e^{ikr} в подынтегральном выражении в (45,3) несуществен при оценке порядка

---

[1]) Это есть частный интеграл уравнения (45,2), к которому может быть прибавлено еще любое решение уравнения без правой части (т. е. невозмущенного уравнения (45,1)).

величины, и весь интеграл будет порядка $\psi^{(0)}|U|a^2$, так что $\psi^{(1)} \sim (ma^2|U|/\hbar^2)\,\psi^{(0)}$, и мы получаем условие

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} \qquad (\text{при} \quad ka \lesssim 1). \tag{45,4}$$

Отметим, что выражение $\hbar^2/ma^2$ имеет простой физический смысл — это есть порядок величины кинетической энергии, которой обладала бы частица, заключенная в объеме с линейными размерами a (поскольку, согласно соотношению неопределенности, ее импульс был бы $\sim\hbar/a$).

Рассмотрим, в частности, потенциальную яму настолько неглубокую, что для нее выполняется условие (45,4). Легко видеть, что в такой яме не существует отрицательных уровней энергии (*R. Peierls*, 1929); мы видели это уже в задаче к § 33 для частного случая сферически-симметричной ямы. Действительно, при $E = 0$ невозмущенная волновая функция сводится к постоянной, которую можно условно принять равной единице: $\psi^{(0)} = 1$. Поскольку $\psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}$, то ясно, что волновая функция движения в яме, $\psi = 1 + \psi^{(1)}$, нигде не обращается в нуль; собственная же функция, не имеющая узлов, относится к нормальному состоянию, так что $E = 0$ остается наименьшим возможным значением энергии частицы. Таким образом, если яма недостаточно глубока, то возможно только инфинитное движение частицы — частица не может «захватиться» ямой. Обратим внимание на то, что этот результат имеет специфически квантовый характер — в классической механике частица может совершать финитное движение в любой потенциальной яме.

Необходимо подчеркнуть, что все сказанное относится только к трехмерной яме. В одно- и двумерной яме (т. е. в которой поле есть функция только от одной или двух координат) всегда имеются уровни отрицательной энергии (см. задачи к этому параграфу). Это связано с тем, что в одно- и двумерном случаях рассматриваемая теория возмущений вообще неприменима при равной нулю (или очень малой) энергии E [1]).

В случае больших энергий, когда $ka \gg 1$, множитель e^{ikr} в подынтегральном выражении играет существенную роль, сильно

---

[1]) В двумерном случае $\psi^{(1)}$ выражается (как известно из теории двумерного волнового уравнения) в виде аналогичного (45,3) интеграла, в котором вместо $\frac{e^{ikr}}{r}\,dx'\,dy'\,dz'$ стоит $i\pi H_0^{(1)}(kr)\,dx'\,dy'$ ($H_0^{(1)}$ — функция Ганкеля), а $r = \sqrt{(x'-x)^2+(y'-y)^2}$. При $k \to 0$ функция Ганкеля, а с нею и весь интеграл стремятся логарифмически к бесконечности.

Аналогично, в одномерном случае под знаком интеграла, определяющего $\psi^{(1)}$, стоит $2\pi i\,\frac{e^{ikr}}{k}\,dx'$ (где $r = |x'-x|$) и при $k \to 0$ $\psi^{(1)}$ стремится к бесконечности, как $1/k$.

уменьшая величину интеграла. Решение (45,3) может быть в этом случае преобразовано к другому виду, для вывода которого, однако, удобнее обратиться непосредственно к уравнению (45,2). Выберем направление невозмущенного движения в качестве оси x; тогда невозмущенная волновая функция имеет вид $\psi^{(0)} = e^{ikx}$ (постоянный множитель условно полагаем равным единице). Ищем решение уравнения

$$\Delta\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2} U e^{ikx}$$

в виде $\psi^{(1)} = e^{ikx}f$, причем ввиду предполагаемой большой величины k достаточно сохранить в $\Delta\psi^{(1)}$ только те члены, в которых дифференцируется (хотя бы один раз) множитель e^{ikx}. Тогда мы получим для f уравнение

$$2ik\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{2mU}{\hbar^2},$$

откуда

$$\psi^{(1)} = e^{ikx}f = -\frac{im}{\hbar^2 k} e^{ikx}\int U\,dx. \tag{45,5}$$

Оценка этого интеграла дает $|\psi^{(1)}| \sim m|U|a/\hbar^2 k$, так что условием применимости теории возмущений в этом случае будет

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}ka = \frac{\hbar v}{a}, \quad ka \gg 1 \tag{45,6}$$

($v = k\hbar/m$ — скорость частицы). Обратим внимание на то, что это условие — более слабое, чем (45,4). Поэтому, если можно рассматривать поле как возмущение при малых энергиях частицы, то это во всяком случае возможно и при больших энергиях, между тем как обратное, вообще говоря, не имеет места [1]).

Применимость развитой здесь теории возмущений к кулонову полю требует особого рассмотрения. В поле $U = \alpha/r$ нельзя выделить конечной области пространства, вне которой U было бы значительно меньше, чем внутри нее. Искомое условие можно получить, написав в (45,6) переменное расстояние r вместо параметра a; это приводит к неравенству

$$\frac{\alpha}{\hbar v} \ll 1. \tag{45,7}$$

[1]) В одномерном случае условие применимости теории возмущений дается неравенством (45,6) при всех ka. Вывод условия (45,4), проведенный выше для трехмерного случая, в одномерном случае невозможен ввиду отмеченной в примечании на стр. 198 расходимости построенной таким способом функции $\psi^{(1)}$.

Таким образом, при больших энергиях частицы кулоново поле можно рассматривать как возмущение [1]).

Наконец, выведем формулу, приближенно определяющую волновую функцию частицы с энергией E, везде значительно превышающей потенциальную энергию U (выполнения каких-либо других условий при этом не требуется). В первом приближении зависимость волновой функции от координат такая же, как для свободного движения (направление которого выберем в качестве оси x). Соответственно этому, ищем ψ в виде $\psi = e^{ikx}F$, где F есть функция координат, меняющаяся медленно по сравнению с множителем e^{ikx} (о ней, однако, нельзя, вообще говоря, утверждать, что она близка к единице). Подставляя в уравнение Шредингера, получим для F уравнение

$$2ik\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{2m}{\hbar^2}UF, \qquad (45,8)$$

откуда

$$\psi = e^{ikx}F = \mathrm{const}\cdot e^{ikx}\exp\left(-\frac{i}{\hbar v}\int U\,dx\right). \qquad (45,9)$$

Это и есть искомое выражение. Следует, однако, иметь в виду, что оно неприменимо на слишком больших расстояниях. В уравнении (45,8) опущен член ΔF, содержащий вторые производные от F. Производная $\partial^2F/\partial x^2$, вместе с первой производной $\partial F/\partial x$, стремится на больших расстояниях к нулю. Производные же по поперечным координатам y, z к нулю не стремятся, и пренебрежение ими возможно лишь при условии $x \ll ka^2$.

Задачи

1. Определить уровень энергии в одномерной потенциальной яме малой глубины; предполагается, что условие (45,4) выполнено.

Решение. Делаем предположение, подтверждающееся результатом, что уровень энергии $|E| \ll |U|$. Тогда в правой стороне уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E)\psi$$

можно в области ямы пренебречь E, а также считать ψ постоянной, которую без ограничения общности можно положить равной единице:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}U.$$

Проинтегрируем это равенство по dx между двумя точками $\pm x_1$ такими, что $a \ll x_1 \ll 1/\varkappa$, где a — ширина ямы, а $\varkappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$. Ввиду сходимости инте-

[1]) Надо иметь в виду, что интеграл (45,5) с полем $U = \alpha/r$ расходится (логарифмически) при больших $x/\sqrt{y^2+z^2}$. Поэтому получаемая с помощью теории возмущений волновая функция в кулоновом поле неприменима внутри узкого конуса вокруг оси x.

грала от $U(x)$ можно распространить интегрирование справа по всей области от $-\infty$ до $+\infty$:

$$\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{-x_1}^{x_1} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} U\,dx \qquad (1)$$

Вдали от ямы волновая функция имеет вид $\psi = e^{\pm\varkappa x}$. Подставляя это в (1), найдем

$$-2\varkappa = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} U\,dx$$

или

$$|E| = \frac{m}{2\hbar^2}\left(\int_{-\infty}^{+\infty} U\,dx\right)^2.$$

Мы видим, в согласии со сделанным предположением, что величина уровня оказывается малой величиной более высокого (второго) порядка, чем глубина ямы.

2. Определить уровень энергии в двумерной потенциальной яме $U(r)$ (r — полярная координата в плоскости) малой глубины; предполагается, что интеграл $\int\limits_0^\infty rU\,dr$ сходится.

Решение. Поступая, как в предыдущей задаче, получим в области ямы уравнение

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}U.$$

Интегрируя его по dr от 0 до r_1 (где $a \ll r_1 \ll 1/\varkappa$), имеем

$$\left.\frac{d\psi}{dr}\right|_{r=r_1} = \frac{2m}{\hbar^2 r_1}\int_0^\infty rU(r)\,dr. \qquad (1)$$

Вдали от ямы уравнение двумерного свободного движения

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\psi}{dr}\right) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0$$

имеет решение (обращающееся на бесконечности в нуль) $\psi = \mathrm{const}\cdot H_0^{(1)}(i\varkappa r)$; при малых значениях аргумента главный член в этой функции пропорционален $\ln \varkappa r$. Имея это в виду, приравниваем при $r \sim a$ логарифмические производные от ψ, вычисленные в яме (правая сторона (1)) и вне ее, и получаем

$$\frac{1}{a\ln\varkappa a} \approx \frac{2m}{\hbar^2 a}\int_0^\infty U(r)\,r\,dr,$$

откуда

$$|E| \sim \frac{\hbar^2}{ma^2}\exp\left[-\frac{\hbar^2}{m}\left|\int_0^\infty Ur\,dr\right|^{-1}\right].$$

Мы видим, что уровень энергии оказывается экспоненциально малым по сравнению с глубиной ямы.