

зываются неадекватными. Вблизи границ диффузионной среды мы оказались в состоянии исправить обычное диффузионное приближение как в отношении углового распределения частиц, испускаемых с поверхности в свободное пространство, так и в отношении распределения плотности частиц на глубине под поверхностью, не превосходящей среднего свободного пробега, если только на этом участке можно пренебречь эффектом замедления частиц. Внутри среды мы оказались в состоянии получить улучшение результатов вычислений, основанных на простой «возрастной» теории, для случаев, где значительная доля энергии теряется при столкновениях (легкие атомы-мишени), если только можно пренебречь пространственным изменением плотности частиц и если доля  $1 - \alpha$  частиц, поглощаемых при столкновениях, мала. В других случаях обычная теория диффузии или «возрастная» теория, рассмотренные в § 12.1, оказываются адекватными.

Теперь мы переходим к изучению уравнения совершенно другого типа.

### 12.3. Решение уравнения Шредингера

Движение частицы массы  $M$  в поле с потенциалом  $V(\mathbf{r}, p)$ , где  $\mathbf{r}$  и  $p$  — ее положение и импульс, определяется уравнением Шредингера

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, p)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (12.3.1)$$

где  $\mathcal{H}$  — оператор Гамильтона. Он может быть представлен в виде суммы кинетической и потенциальной энергий частицы

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2M} + V(\mathbf{r}, p).$$

Уравнение (12.3.1), конечно, не учитывает релятивистских и спиновых эффектов. В § 2.6 мы достаточно подробно выяснили происхождение и физическую интерпретацию уравнения Шредингера [см. (2.6.38)] и потому ограничимся здесь кратким обзором соответствующих фактов.

**Определения.** Рассмотрим сначала уравнения, которым удовлетворяет  $\Psi$ . Следует напомнить, что для превращения (12.3.1) в дифференциальное уравнение, необходимо либо  $\mathbf{r}$ , либо  $p$  представить как дифференциальный оператор. В последнем случае

$$p = \frac{\hbar}{i} \nabla,$$

так что уравнение (12.3.1) может быть представлено в виде

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V\left[\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla\right] \right\} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

или

$$[-\nabla^2 + U] \Psi = \frac{i}{\alpha^2} \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

где

$$U = \frac{2M}{\hbar^2} V, \quad \alpha^2 = \frac{\hbar}{2M}.$$

В этих уравнениях волновая функция  $\Psi$  есть функция от  $\mathbf{r}$  и  $t$ .

Полностью эквивалентное этому уравнение Шредингера в импульсном представлении можно получить, заменяя  $\mathbf{r}$  оператором

$$\mathbf{r} = -\frac{\hbar}{i} \nabla_p,$$

где  $x$ -компонентой  $\nabla_p$  служит  $\partial/\partial p_x$ . Обозначив соответствующую волновую функцию  $\Phi(\mathbf{p}, t)$ , т. е. заменив  $\Psi$  через  $\Phi$  в (12.3.1), получаем уравнение Шредингера в импульсном представлении

$$\left\{ \frac{p^2}{2M} + V \left[ -\frac{\hbar}{i} \nabla_p, \mathbf{p} \right] \right\} \Phi(\mathbf{p}, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t}.$$

Функции  $\Phi$  и  $\Psi$  являются взаимными преобразованиями Фурье

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{v}.$$

Обратимся теперь к физической интерпретации волновой функции  $\Psi$ . (Чтобы получить интерпретацию для  $\Phi$ , требуется только видоизменить приводимое ниже рассуждение, проведя его в терминах пространства импульсов.) Ключом для понимания смысла  $\Psi$  служит основное положение, согласно которому  $|\Psi|^2 d\mathbf{v}$  есть относительная вероятность найти частицу в элементе объема  $d\mathbf{v}$  в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$ . Это положение дает возможность вычислить среднее значение любой динамической величины  $F$ . (Напомним, что в квантовой механике эти величины не обязательно имеют определенные значения.) Среднее значение  $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  есть

$$F_{\text{ср.}}(t) = \frac{\iiint \bar{\Psi}(\mathbf{r}) F \left[ \mathbf{r}, \frac{\hbar}{i} \nabla \right] \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{v}}{\iiint |\Psi|^2 d\mathbf{v}}. \quad (12.3.2)$$

Если рассматриваемая система состоит из многих одинаковых не взаимодействующих частиц<sup>1)</sup>, то  $|\Psi|^2$  представляет плотность частиц в точке  $\mathbf{r}$ . Соответственно этой плотности определяется плотность тока  $\mathbf{J}$ , удовлетворяющая уравнению непрерывности

$$\text{div } \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0.$$

Исходя из этого и из уравнения Шредингера, для  $\mathbf{J}$  получаем

$$\mathbf{J} = -\frac{i\hbar}{2M} [\bar{\Psi} \text{grad } \Psi - \Psi \text{grad } \bar{\Psi}], \quad \mathbf{J} = 2a^2 \text{Im} [\bar{\Psi} \text{grad } \Psi]. \quad (12.3.3)$$

В этом параграфе мы будем преимущественно интересоваться состояниями, в которых энергия имеет определенное значение  $E$ ; оно является собственным значением уравнения

$$\mathcal{H}\Psi = E\Psi.$$

Сравнивая это уравнение с уравнением Шредингера, мы видим, что временная зависимость  $\Psi$  для таких состояний определяется из соотношения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi; \quad |\Psi|^2 \text{ не зависит от } t.$$

Поэтому состояния с определенными значениями энергии *стационарны*. Решение для  $\Psi(t)$  имеет вид

$$\Psi(t) = e^{-iEt/\hbar} \psi, \quad \psi = \Psi(0).$$

Функция  $\psi$  удовлетворяет также уравнению  $\mathcal{H}\psi = E\psi$  или, подробнее,

$$\nabla^2 \psi + [\varepsilon - U] \psi = 0, \quad (12.3.4)$$

где

$$\varepsilon = \frac{2M}{\hbar^2} E, \quad U = \frac{2M}{\hbar^2} V.$$

<sup>1)</sup> Мы предполагаем, что принцип Паули не играет здесь большой роли.

В качестве примера рассмотрим плоскую волну

$$\Psi = e^{i(p \cdot r - Et)/\hbar},$$

Плотность  $|\Psi|^2 = 1$ , и это означает, что относительная вероятность найти частицу в элементе объема  $dv$  не зависит от ее положения, т. е. она одинакова повсюду. Плотность тока  $\mathbf{J} = \mathbf{p}/M$ , т. е. совпадает со скоростью частицы. Для плоской волны импульс имеет определенное значение и равен  $\mathbf{p}$ , поскольку

$$\mathbf{p}\Psi = p\Phi.$$

Эта определенность  $\mathbf{p}$  сопутствует, как мы убедились выше, полной неопределенности положения, как оно и должно быть в силу соотношения неопределенности.

С другой стороны, волновая функция  $e^{-\beta r}$  ( $\beta = \text{const}$ ), описывающая основное состояние электрона в атоме водорода, приводит к току, равному нулю, так как она действительна в этом состоянии; импульс не будет иметь определенного значения. Волновая функция в импульсном представлении для этого состояния имеет вид

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint e^{-i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar} e^{-\beta r} d\mathbf{v}.$$

Этот интеграл можно легко вычислить:

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{\sin(pr/\hbar)}{pr/\hbar} e^{-\beta r} r^2 dr = \frac{8\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\beta}{\left[\beta^2 + \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2\right]^2}.$$

Величина  $|\Phi(\mathbf{p})|^2 dp_x dp_y dp_z$  представляет собой относительную вероятность обнаружить электрон с импульсом, заключенным между  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$ .

В этом параграфе мы на нескольких примерах покажем методы решения уравнений (12.3.1) и (12.3.4). В дальнейшем имеется в виду главным образом разъяснить методы решения, и потому мы, например, вовсе не будем пытаться провести связный разбор строения атома. Многие методы мы продемонстрируем на одномерных примерах; однако будут также рассмотрены некоторые задачи, многомерные по своей природе.

**Гармонический осциллятор.** Одной из простейших и наиболее часто встречающихся динамических задач является задача о частице в поле упругой силы, соответствующей одномерной потенциальной функции  $\frac{1}{2}Kx^2$ . В классической физике такая частица может либо находиться в покое при нулевой энергии в положении равновесия  $x=0$ , либо совершать простое гармоническое колебание с частотой  $\omega/2\pi = \sqrt{K/4\pi^2 M}$  и амплитудой  $\sqrt{2E/K}$ , где  $E$  — ее энергия. Поскольку вероятность присутствия классической частицы обратно пропорциональна ее скорости, эта вероятность равна

$$P = \begin{cases} \frac{1/\pi}{\sqrt{(2E/K) - x^2}}, & x^2 < \frac{2E}{K} \\ 0, & x^2 > \frac{2E}{K}. \end{cases}$$

Интересно сравнить эту величину с соответствующей  $|\Psi|^2$ .

В волновой механике волновая функция  $\Psi$  для стационарного состояния должна иметь показательную зависимость от времени,  $\Psi = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) e^{-i\varepsilon\alpha^2 t}$ , где  $E$  — стационарная энергия частицы и  $\varepsilon = (2M/\hbar^2) E$ . В этом состоянии любое измерение энергии частицы даст значение  $E$ .

В рассматриваемой задаче уравнение для пространственного множителя  $\psi$  имеет вид [см. (2.6.28)]

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\varepsilon - \beta^2 x^2)\psi = 0, \quad (12.3.5)$$

где  $\beta = M\omega/\hbar$  и  $\omega^2 = K/M$ . Это уравнение имеет нерегулярную особую точку на бесконечности. Замена независимой переменной на  $z = \beta x^2$  показывает, что  $\psi$  может быть выражена через вырожденную гипергеометрическую функцию от  $z$ . Точнее,  $\psi$  должна быть пропорциональна функции Вебера

$$D_n(x\sqrt{2\beta}) = 2^{n/2} e^{-\beta x^2/2 + i\pi n} U_2\left(-\frac{1}{2}n \mid \frac{1}{2} \mid \beta x^2\right), \quad \text{Re } x > 0,$$

определенной в (11.2.63), со свойствами, приведенными в таблице в конце гл. 11. В нашем случае  $n = (\varepsilon/2\beta) - 1/2 = (E/\hbar\omega) - 1/2$ .

Функция  $D_n$  выбрана так, что она исчезает при  $x \rightarrow +\infty$ , но она, вообще говоря, не обязана исчезать при  $x \rightarrow -\infty$ . Используя соотношения между  $D_n(x)$ ,  $D_n(-x)$  и  $D_{-n-1}(ix)$ , мы находим, что

$$D_n(x\sqrt{2\beta}) \simeq \begin{cases} (x\sqrt{2\beta})^n e^{-\beta x^2/2}, & x \rightarrow \infty, \\ \frac{V\sqrt{2\pi}}{\Gamma(-n)} \frac{e^{\beta x^2/2}}{(-x\sqrt{2\beta})^{n+1}}, & x \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

если только  $n$  не нуль или не целое положительное число. В последнем случае  $D_n(z) = (-1)^n D_n(-z)$ . Волновая функция, интегрируемая вместе с квадратом, получается, следовательно, только если  $n = 0, 1, 2, \dots$ , что ограничивает допустимые значения энергии частицы дискретным рядом значений

$$\varepsilon_n = 2\beta n + \beta, \quad \text{или} \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (12.3.6)$$

Чтобы состояние, описываемое функцией  $\Psi$ , было стационарным при определенном значении энергии, пространственный множитель  $\psi$  должен быть стоячей волной. Это требование ограничивает допустимые значения энергии точно так же, как обычно ограничиваются значения частоты свободных колебаний струны. Недопустимо, чтобы частица обладала нулевой энергией [это связано с соотношением неопределенности (2.6.2), так как невозможно, чтобы частица с точно нулевым импульсом достоверно находилась в точке  $x = 0$ ]. Допустимые энергетические уровни распределены равномерно с интервалом  $\hbar\omega$ . Этот результат следует сравнить с (2.6.31), где гармонический осциллятор был рассчитан операторным методом.

Когда  $n$  — целое число, функции Вебера становятся пропорциональными полиномам Эрмита, рассмотренным в таблице в конце гл. 6. Используя интегральные соотношения для вычисления нормирующих множителей, убеждаемся, что допустимая волновая функция, соответствующая энергии  $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ , есть  $n$ -я нормированная собственная функция

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{V\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\beta x^2} H_n(x\sqrt{\beta}), \quad (12.3.7)$$

где

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}, \quad \beta = \frac{M\omega}{\hbar},$$

есть полином  $n$ -й степени от  $z$ , содержащий либо только четные степени  $z$  (если  $n$  четное), либо только нечетные степени (если  $n$  нечетное), причем

знаки последовательных коэффициентов чередуются. Отсюда следует, что все  $n$  корней уравнения  $H_n(z) = 0$  действительны и симметрично расположены относительно  $z = 0$ .

Среднее поведение гармонического осциллятора может быть изучено путем вычисления среднего от смещения и от квадрата смещения. Из (12.3.2) и рекуррентной формулы, приведенной в таблице в конце гл. 6, видно, что

$$x \sqrt{\beta} \varphi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2} n} \varphi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{1}{2} (n+1)} \varphi_{n+1}(x),$$

$$\beta x^2 \varphi_n(x) = \frac{1}{2} \sqrt{n(n-1)} \varphi_{n-2}(x) + \left(n + \frac{1}{2}\right) \varphi_n(x) + \frac{1}{2} \sqrt{(n+1)(n+2)} \varphi_{n+2}(x).$$

Из первого из этих соотношений и взаимной ортогональности  $\varphi_n$  следует, что среднее смещение частицы в  $n$ -м состоянии равно нулю:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \varphi_n^2(x) dx = 0.$$

Таким образом, колебания симметричны относительно положения равновесия  $x = 0$ . Среднее значение квадрата смещения

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \varphi_n^2(x) dx = \frac{n + \frac{1}{2}}{\beta} = \frac{E_n}{K}$$

составляет половину квадрата максимального смещения классической частицы, имеющей энергию  $E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Поэтому, покада речь идет о поведении в среднем, квантовый осциллятор соответствует классическому осциллятору с той только разницей, что для него допустимы только дискретные значения энергии  $E_n$ .

В качестве упражнения на применение метода перевала и для сравнения с классическими результатами найдем асимптотическое выражение для  $\varphi$  при больших  $n$ . Полагая,  $A_n^2 = \beta/2^n n! \sqrt{\pi}$  и используя (5.3.53), мы получаем

$$\varphi_n = A_n 2^n \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}n + 1\right)}{2\pi i} e^{-\frac{1}{2}z^2} \oint e^{z^2 t - \left(\frac{1}{2}n + 1\right) \ln t + \left(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}\right) \ln(1-t)} dt,$$

где контур, показанный на рис. 5.12, проходит от  $-\infty$ , обходит точку  $t = 0$  в положительном направлении и идет обратно к  $-\infty$ . Седловая точка для экспоненты в интеграле находится там, где производная от

$$f(t) = z^2 t - \left(\frac{1}{2}n + 1\right) \ln t + \left(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}\right) \ln(1-t)$$

равна нулю, т. е. совпадает с корнем уравнения

$$f'(t) = z^2 - \frac{\frac{1}{2}n + 1 - \frac{3}{2}t}{t(1-t)} = 0.$$

Когда, приблизительно,  $z^2 < 2n + 1$ , две седловые точки расположены симметрично над и под действительной осью  $t$ ; получающийся интеграл имеет множителем косинус. Когда  $z^2 > 2n + 1$ , корни находятся на действительной оси  $t$  и контур должен пройти только через один из них, ближайший к  $t = 0$ .

Действуя, как в § 4.6, мы в конце концов получим для  $n \gg 1$

$$\varphi_n \simeq \begin{cases} \frac{\beta^{1/4} \sqrt{2/\pi}}{(2n-z^2)^{1/4}} \cos \left[ \frac{1}{2} z \sqrt{2n-z^2} - \frac{1}{2} \pi n + n \arcsin \left( \frac{z}{\sqrt{2n}} \right) \right], & z^2 < 2n, \\ \sqrt{n!} \left( \frac{\beta}{\pi} \right)^{1/4} z^n e^{-\frac{1}{2} z^2}, & z^2 > 2n, \end{cases}$$

где  $z^2 = \beta x^2$  и  $\beta = M\omega/\hbar$ .

Квадрат модуля первого выражения может быть записан в более простой форме:

$$|\varphi_n|^2 \simeq \frac{2/\pi^1}{\sqrt{a_n^2 - x^2}} \cos^2 \left[ \frac{1}{2} \beta x \sqrt{a_n^2 - x^2} + \frac{1}{2} \beta a_n^2 \arcsin \left( \frac{x}{a_n} \right) - \frac{1}{2} \pi n \right], \quad x < a_n,$$

где  $a_n^2 = (2n+1)/\beta = 2E_n/M\omega^2 = 2E_n/K$  и  $K = M\omega^2$ . Среднее значение<sup>1)</sup>  $|\varphi_n|^2$  при  $n \gg 1$  в большей части классически допустимой области изменения  $x$  равно поэтому (среднее значение квадрата косинуса есть 1/2) классической вероятности  $P$ , вычисленной в начале этого пункта.

Таким образом, различие между квантовой и классической механикой заключается, с одной стороны, в спектре допустимых энергий и, с другой стороны, в плотности вероятности нахождения частицы. В квантовой механике допускаются только значения энергии  $E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ , в то время как в классическом случае допускаются все положительные значения. Когда  $\hbar\omega$  мало по сравнению с рассматриваемыми значениями энергии, эта разница не столь значительна, но когда  $\hbar\omega$  не мало, различие становится заметным. В квантовой механике вероятность обнаружения частицы  $|\Psi_n|^2$  (в состоянии с энергией  $E_n$ ) имеет вблизи начала координат серию узлов, отстоящих друг от друга на расстояние примерно  $2\pi/\beta a_n$ . Для малых значений  $n$   $|\Psi_n|^2$  значительно отличается от классического  $P$ , вычисленного в начале этого пункта; для больших значений  $n$  среднее от  $|\Psi_n|^2$ , взятое по интервалу в несколько длин волн, стремится к  $P$  для  $x < a_n$ . Если энергия не известна точно, так что  $\Psi$  получается суперпозицией состояний для соседних энергий, то узлы различных состояний не будут совпадать и выражение для  $|\Psi|^2$  будет полностью совпадать с  $P$  для больших сравнительно с  $\hbar\omega$  значений  $E$ . Однако независимо от того, велико ли  $\hbar\omega$  по сравнению с  $E$  или мало,  $|\Psi|^2$  не стремится к бесконечности при  $x = a_n$  (как это имеет место для  $P$ ) и не равно нулю при  $x > a_n$  ( $P$  при этом равно нулю). В квантовой механике имеется отличная от нуля (хотя обычно малая) вероятность того, что частица будет обнаружена в области, где потенциальная энергия больше, чем полная энергия. Это обстоятельство следует из волновых свойств функции  $\Psi$ .

**Короткодействующие силы.** Другим простым примером потенциальной функции, полезным при изучении ядерных сил, служит предельный случай сил притяжения, действующих только на очень коротком отрезке оси  $x$ . Соответствующая потенциальная энергия равна нулю почти на всей оси  $x$ , но вблизи нуля она имеет глубокую узкую впадину, обычно называемую «потенциальной ямой». В предельном случае  $V$  равно  $-V_0\delta(x)$ , и соответствующее уравнение Шредингера для состояния с определенной энергией имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [e + 2\alpha\delta(x)]\psi = 0 \quad (12.3:8)$$

<sup>1)</sup> Речь идет об усреднении по малому интервалу оси.  $x$ —Прим. перев.

где  $\alpha = MV_0/\hbar^2$ ,  $\varepsilon = 2ME/\hbar^2$ . Интегрируя это уравнение на малом интервале  $x$  вблизи нуля, мы видим, что при  $x=0$  производная  $\psi$  должна иметь разрыв со скачком, равным  $-2\alpha\psi(0)$ :

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_{-0} - \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_{+0} = 2\alpha\psi(0).$$

При таком потенциале существует только одно «связанное» состояние (с отрицательной энергией), а именно:

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2}} e^{-\alpha|x|}, \quad \varepsilon = -\alpha^2, \quad E = \frac{MV_0^2}{2\hbar^2}.$$

Функция  $\psi_0(x)$  имеет максимум при  $x=0$  и становится исчезающе малой при больших  $|x|$ .

Состояния с положительной энергией соответствуют свободным частицам, движущимся с постоянной скоростью  $v$  всюду, кроме узкой области, близкой к  $x=0$ , где действует сила. Мы используем волновые функции свободной частицы  $e^{\pm ikx}$  ( $\varepsilon = k^2$ ,  $k = Mv/\hbar$ ) и сопрягаем их при  $x=0$  так, чтобы обеспечить требуемый разрыв производной. Например, одним из возможных решений будет функция

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} - \frac{\alpha}{\alpha + ik} e^{-ikx}, & x < 0, \\ \frac{ik}{\alpha + ik} e^{ikx}, & x > 0. \end{cases}$$

Формула (12.3.3) показывает, что эта функция описывает поток частиц, которые движутся из  $-\infty$  и, столкнувшись с потенциальной ямой при  $x=0$ , частично отражаются обратно к  $-\infty$ , а частично продолжают движение к  $+\infty$ . Приведенные ранее рассуждения показывают, что квадраты коэффициентов различных членов найденной функции соответствуют отношению  $R$  плотности отраженного потока к начальной плотности и отношению  $T$  плотности потока продолжающих движение частиц к начальной плотности. Таким образом,

$$R = \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + k^2}, \quad T = 1 - R = \frac{k^2}{\alpha^2 + k^2}.$$

Чем глубже яма, тем больше отражение; чем больше скорость частиц ( $k = Mv/\hbar$ ), тем меньше отражение. Дальнейшее рассмотрение физических выводов, проистекающих из этих формул, мы оставим до разбора формул (12.3.29) и (12.3.31).

**Влияние возмущения.** В квантовой механике часто встречается следующая задача. К системе в определенном стационарном состоянии прилагается при  $t=0$  дополнительная возмущающая сила; требуется найти последующее поведение системы. Одна из простейших задач этого типа допускает точное решение для гармонического осциллятора, и это решение послужит нам образцом для других более сложных задач. Предположим, что при  $t_0 < 0$  система, описываемая (12.3.5), находилась в  $n$ -м состоянии с энергией  $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$  и волновой функцией  $\varphi_n e^{-i\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)t}$ , где  $\varphi_n$  определяется (12.3.7); при  $t=0$  включается возмущающий потенциал  $+Fxi(t)$ . Следовательно, после  $t=0$  уравнение для пространственной части волновой функции будет иметь вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[ \varepsilon - \beta^2 x^2 - \frac{2M}{\hbar^2} Fx \right] \psi = 0,$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[ \varepsilon + \left(\frac{F}{\omega\hbar}\right)^2 - \beta^2(x+b)^2 \right] \psi = 0,$$

где  $b = F/M\omega^2 = F/K$  есть смещение положения равновесия, вызванное возмущающей силой  $F$ .

Новое решение, которое всюду ограничено, является, конечно, линейной комбинацией смещенных собственных функций:

$$\Psi = \sum_{m=0}^{\infty} A_m \varphi_m(x+b) \exp \left[ -i\omega \left( m + \frac{1}{2} \right) t + \frac{i}{\hbar} E_b t \right], \quad (12.3.9)$$

где  $E_b = F^2/2M\omega^2 = \frac{1}{2}(F^2/K)$  — снижение минимума потенциальной энергии, вызванное возмущающей силой. Чтобы получить полное решение, нам следует найти ту линейную комбинацию  $\varphi_m(x+b)$ , которая равна  $\varphi_n(x)$  при  $t=0$ .

Чтобы получить этот результат, мы используем соотношение, вытекающее из формул, приведенных в конце гл. 6,

$$\begin{aligned} \varphi_n(x-b) &= \sum_{m=0}^n \varphi_m(x) e^{\gamma^2/4} \frac{(-\gamma/\sqrt{2})^{n-m}}{(n-m)!} \sqrt{\frac{n!}{m!}} F \left( n+1 \mid n-m+1 \mid -\frac{1}{2} \gamma^2 \right) + \\ &+ \sum_{m=n+1}^{\infty} \varphi_m(x) e^{\gamma^2/4} \frac{(\gamma/\sqrt{2})^{m-n}}{(m-n)!} \sqrt{\frac{m!}{n!}} F \left( m+1 \mid m-n+1 \mid -\frac{1}{2} \gamma^2 \right), \end{aligned} \quad (12.3.10)$$

где  $\gamma^2 = \beta b^2 = M\omega F^2/\hbar K^2$ . Из этого соотношения мы получим окончательное решение

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \varphi_n(x) e^{-i\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) t}, & t < 0, \\ \sum_{m=0}^{\infty} A_m^n \varphi_m(x+b) e^{-i\omega \left( m + \frac{1}{2} \right) t + \frac{i}{\hbar} E_b t}, & t > 0, \end{cases} \quad (12.3.11)$$

где  $E_b = \frac{1}{2}(F^2/K) = \frac{1}{2} M\omega^2 b^2 = \frac{1}{2} \omega \hbar \gamma^2$  и где

$$A_m^n = \begin{cases} e^{\gamma^2/4} \frac{(-\gamma/\sqrt{2})^{n-m}}{(n-m)!} \sqrt{\frac{n!}{m!}} F \left( n+1 \mid n-m+1 \mid -\frac{1}{2} \gamma^2 \right), & m \leq n, \\ e^{\gamma^2/4} \frac{(\gamma/\sqrt{2})^{m-n}}{(m-n)!} \sqrt{\frac{m!}{n!}} F \left( m+1 \mid m-n+1 \mid -\frac{1}{2} \gamma^2 \right), & m \geq n. \end{cases}$$

Если возмущающая сила мала по сравнению с  $K\sqrt{\beta}$ , то  $\gamma$  есть малая величина и в первом приближении по  $\gamma$  решение имеет вид

$$\Psi \simeq \begin{cases} \varphi_n(x) e^{-i\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) t}, & t < 0, \\ \left\{ \varphi_n(x+b) + \gamma \left[ \sqrt{\frac{1}{2}(n+1)} \varphi_{n+1}(x+b) e^{-i\omega t} - \right. \right. \\ \left. \left. - \sqrt{\frac{1}{2}n} \varphi_{n-1}(x+b) e^{i\omega t} \right] \right\} e^{-i\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) t + (i/\hbar) E_b t}, & t > 0. \end{cases}$$



Плотность частиц в этом приближении равна

$$|\Psi|^2 \simeq \begin{cases} [\varphi_n(x)]^2, & t < 0, \\ [\varphi_n(x+b)]^2 + 2\gamma \left[ \sqrt{\frac{1}{2}(n+1)} \varphi_n \varphi_{n+1} - \right. \\ \left. - \sqrt{\frac{1}{2}n} \varphi_n \varphi_{n-1} \right] \cos(\omega t), & t > 0. \end{cases} \quad (12.3.12)$$

Следовательно, плотность частиц до момента  $t=0$  была стационарна и характеризовалась собственной функцией  $\varphi_n$ ; после включения при  $t=0$  возмущающей силы состояние становится комбинацией различных собственных функций и плотность осциллирует с течением времени. Так как для собственных функций, определенных в (12.3.7), справедливо соотношение

$$\frac{1}{\sqrt{\beta}} \frac{d}{dx} \varphi_n(x) = -\sqrt{\frac{1}{2}(n+1)} \varphi_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{1}{2}n} \varphi_{n-1}(x),$$

то приближенно выражение для плотности частиц после момента времени  $t=0$  может быть преобразовано к виду

$$|\Psi|^2 \simeq [\varphi_n(x+b)]^2 - 2b \left[ \varphi_n(x+b) \cdot \frac{d}{dx} \varphi_n(x+b) \right] \cos(\omega t) \simeq \\ \simeq [\varphi_n(x+b - b \cos \omega t)]^2, \quad t > 0.$$

Это показывает, что возмущение нарушает симметричное относительно  $x=0$  распределение  $(\varphi_n)^2$  и создает новое распределение, симметричное в среднем относительно нового положения равновесия  $x=-b$ , но имеющее небольшую антисимметрическую осциллирующую часть. При  $t=0$  центр распределения все еще находится в точке  $x=0$ , но через промежуток времени  $t=\pi/\omega$  он переместится в точку  $x=-2b$ , в момент времени  $t=2\pi/\omega$  центр снова будет находиться в  $x=0$  и т. д.; центр распределения колеблется с частотой  $\omega/2\pi$  и амплитудой  $b$ . Это колебание, очевидно, совпадает с тем колебанием, которое совершала бы классическая частица под воздействием подобной возмущающей силы, так что, по крайней мере в этом простом случае, мы имеем отдаленное сходство между поведением плотности вероятности  $|\Psi|^2$  и соответствующей классической частицы.

**Приближенные формулы для возмущения общего вида.** Для расчета стационарных состояний систем, которые только незначительно отличаются от гармонического осциллятора, или для расчета поведения гармонического осциллятора, возмущенного какой-либо небольшой дополнительной силой, можно применять методы, рассмотренные в гл. 9. Предположим, что возмущающий потенциал есть  $V'(x)$ , так что уравнение Шредингера для стационарного состояния [соответствующее (12.3.5)] будет иметь вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\varepsilon - \beta^2 x^2) \psi = \frac{2M}{\hbar^2} V'(x) \psi, \quad (12.3.13)$$

где  $\varepsilon = 2ME/\hbar^2$ . Методом гл. 9 это уравнение можно преобразовать в интегральное уравнение для  $\psi$  и  $\varepsilon$ :

$$\psi(x) = \frac{2M}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} G_\varepsilon(x|x_0) V'(x_0) \psi(x_0) dx_0. \quad (12.3.14)$$

Ядро  $G$  — это функция Грина для гармонического осциллятора, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{d^2G}{dx^2} + (\varepsilon - \beta^2 x^2) G = \delta(x - x_0),$$

где  $\varepsilon = 2ME/\hbar^2$  и  $\beta = M\omega/\hbar$ , и краевому условию:  $G$  стремится к нулю при  $|x| \rightarrow \infty$ .

В данном случае удобнее всего выразить функцию Грина в виде ряда по собственным функциям

$$G_\varepsilon(x|x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(x) \bar{\varphi}_n(x_0)}{\varepsilon - \varepsilon_n}, \quad (12.3.15)$$

где  $\varphi_n$  — собственные функции для невозмущенного гармонического осциллятора, приведенные в (12.3.7), а  $\varepsilon_n$  — соответствующие значения величины  $2ME/\hbar^2$ , т. е.  $\varepsilon_n = 2\beta \left( n + \frac{1}{2} \right)$ . Подставляя это разложение в (12.3.14), мы получаем

$$\psi(x) = \frac{2M}{\hbar^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\varphi_m(x)}{\varepsilon - \varepsilon_m} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(x_0) V'(x_0) \psi(x_0) dx_0.$$

Мы ищем решение, которое при стремлении  $V'$  к нулю приближается к какой-нибудь собственной функции, например к  $\varphi_n$ . Поэтому мы прежде всего нормируем  $\psi$  так, чтобы коэффициент при  $\varphi_n$  был равен единице. Таким образом,

$$\begin{aligned} \psi &= \varphi_n(x) + \sum_{m \neq n} \frac{\varphi_m(x)}{E - E_m} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\varphi}_m(x_0) V'(x_0) \psi(x_0) dx_0, \\ E &= E_n + \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\varphi}_n(x_0) V'(x_0) \psi(x_0) dx_0, \end{aligned} \quad (12.3.16)$$

где  $E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ . Эту пару точных уравнений можно решить так, как решают в большинстве случаев интегральные уравнения, т. е. последовательными итерациями. Подставим сначала в правую часть равенства (12.3.16)  $\psi = \varphi_n$  и вычислим следующее приближение, которое затем вновь подставим в правую часть, и т. д. Соответствующее значение энергии можно тогда определить, подставляя  $\psi$ , полученное из первого уравнения, во второе (см. в § 9.1 дальнейшие детали).

Первым приближением будет  $\varepsilon = \varepsilon_n + (2M/\hbar^2) V'_{nn}$  так что

$$E^1 = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + V'_{nn}, \quad \psi^1 = \varphi_n(x) + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{mn}}{E - E_m} \varphi_m(x), \quad (12.3.17)$$

где числа

$$V'_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\varphi}_m(x_0) V'(x_0) \varphi_n(x_0) dx_0$$

называют *матричными элементами*  $V'$  по отношению к невозмущенным состояниям  $m$  и  $n$ . В выражение для  $\psi^1$  вместо  $E$  можно подставить  $E^1$ . Второе приближение будет тогда получено подстановкой  $\psi^1$  в правую часть уравнения (12.3.16):

$$\begin{aligned} E^2 &= \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + V'_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{nm} V'_{mn}}{E - E_m}, \\ \psi^2 &= \varphi_n(x) + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{mn}}{E - E_m} \varphi_m(x) + \sum_{\substack{m \neq n \\ p \neq n}} \frac{V'_{mp} V'_{pn}}{(E - E_p)(E - E_m)} \varphi_m(x). \end{aligned}$$

Чтобы вычислить энергию с точностью до членов второго порядка, в сумму первой формулы нужно подставить вместо  $E$  величину  $E_n$ . В выражении

для  $\psi^2$  в первой сумме  $E$  должно быть заменено величиной  $E^1$ , но во второй сумме для получения второго приближения достаточно взять вместо  $E$  величину  $E_n$ . Теперь можно написать полное разложение

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + V'_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{nm} V'_{mn}}{E - E_m} + \sum_{\substack{m \neq n \\ p \neq n}} \frac{V'_{nm} V'_{mp} V'_{pn}}{(E - E_p)(E - E_m)} + \\ + \sum_{\substack{m \neq n \\ p \neq n \\ q \neq n}} \frac{V'_{nm} V'_{mp} V'_{pq} V'_{qn}}{(E - E_p)(E - E_q)(E - E_m)} + \dots, \\ \psi = \varphi_n(x) + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{mn}}{E - E_m} \varphi_m(x) + \sum_{\substack{m \neq n \\ p \neq n}} \frac{V'_{mp} V'_{pn}}{(E - E_p)(E - E_m)} \varphi_m(x) + \quad (12.3.18) \\ + \sum_{\substack{m \neq n \\ p \neq n \\ q \neq n}} \frac{V'_{mq} V'_{qp} V'_{pn}}{(E - E_q)(E - E_p)(E - E_m)} \varphi_m + \dots$$

Для получения приближения заданного порядка (скажем  $\nu$ -го) в последовательных суммах выражения для  $E$  (12.3.18)  $E$  должно быть заменено значениями  $E^{\nu-2}$ ,  $E^{\nu-3}$ , ... и т. д., а в последовательных суммах выражения для  $\psi$  — значениями  $E^{\nu-1}$ ,  $E^{\nu-2}$ , ... Например,

$$E^2 = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + V'_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{nm} V'_{mn}}{\hbar\omega(n-m)}, \\ \psi^2 = \varphi_n(x) + \sum_{m \neq n} \frac{V'_{mn}}{\hbar\omega(n-m) + V'_{nn}} \varphi_m(x) + \sum_{\substack{m \neq n \\ p \neq n}} \frac{V'_{mp} V'_{pn}}{[\hbar\omega(n-p)][\hbar\omega(n-m)]} \varphi_m(x).$$

Условия, при которых эти ряды сходятся, были рассмотрены в гл. 9. Другие формулы теории возмущений, полезные, когда эти ряды плохо сходятся, также указаны в гл. 9.

Для иллюстрации метода возмущений мы вычислим энергию и волновые функции линейного возмущения  $Fx$ , для которого точное решение приведено в (12.3.11). Из соотношения

$$xV\bar{\beta}\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2}(n+1)} \varphi_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{1}{2}n} \varphi_{n-1}(x)$$

получаются следующие выражения для матричных элементов  $V'_{sn}$ :

$$V'_{sn} = F \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}} \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{2}(n+1)}, & s = n+1, \\ \sqrt{\frac{1}{2}n}, & s = n-1, \\ 0, & s \text{ — любое другое.} \end{cases}$$

Следовательно, согласно (12.3.18), во втором приближении возмущенные энергии выражаются формулой

$$E \approx \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{F^2 \hbar}{2M\omega} \left( \frac{n-n-1}{\hbar\omega} \right) = E_n - E_b.$$

Возмущенная волновая функция в первом приближении имеет вид

$$\begin{aligned} \psi &\simeq \varphi_n(x) - \gamma \left[ \sqrt{\frac{1}{2}(n+1)} \varphi_{n+1}(x) - \sqrt{\frac{1}{2}n} \varphi_{n-1}(x) \right] \simeq \\ &\simeq \varphi_n(x) + b \frac{d}{dx} \varphi_n(x) \approx \varphi_n(x+b), \end{aligned}$$

что совпадает с решением (12.3.9).

**Волновые функции в импульсном представлении.** В § 2.6 [см. рассуждение после (2.6.28)] было показано, что если оператор энергии  $\mathcal{H}$  для стационарного состояния выражен через импульс  $p$  и положение частицы  $q$ , то уравнение для пространственно-зависящей волновой функции  $\psi$  получается заменой  $p$  в  $H$  на  $-\hbar i(\partial/\partial q)$  и воздействием оператора  $\mathcal{H}$  на  $\psi$ . Для гармонического осциллятора такая волновая функция приведена в (12.3.7). Уравнение для волновой функции в импульсном представлении, квадрат модуля которой представляет вероятность того, что частица имеет соответствующий импульс, получается заменой  $x$  в  $\mathcal{H}$  на  $\hbar i(\partial/\partial p)$  и применением полученного оператора к волновой функции. В случае гармонического осциллятора после отделения временного множителя  $e^{-iEt/\hbar}$  для волновой функции получается уравнение

$$\left[ \frac{d^2 \chi}{dp^2} + \left[ \frac{2E}{M\hbar^2\omega^2} - \frac{p^2}{M^2\omega^2\hbar^2} \right] \right] \chi = 0. \quad (12.3.19)$$

Это уравнение имеет ту же форму, что (12.3.5), и оно должно иметь решения такого же типа. Допустимые значения энергии, для которых  $\chi$  конечно при всех значениях  $p$ , будут

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

так же, как и в (12.3.6) (как оно, конечно, и должно быть, поскольку речь идет о тех же стационарных состояниях, представленных только не через положение частицы, а через ее импульс). Соответствующие волновые функции в импульсном представлении имеют вид

$$\chi_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{1}{\pi M\omega\hbar} \right)^{1/4} e^{-p^2/2M\hbar\omega} H_n \left( \frac{p}{\sqrt{M\omega\hbar}} \right). \quad (12.3.20)$$

Эти функции вновь должны быть нормированы к единице, поскольку интеграл от  $\chi^2$  по всем значениям  $p$  соответствует достоверности того, что импульс частицы находится в области  $-\infty < p < \infty$ .

Средний импульс равен нулю, и, используя рекуррентные соотношения для полиномов Эрмита  $H_n$ , можно показать, что среднее значение квадрата импульса частицы в  $n$ -м состоянии равно

$$\int_{-\infty}^{\infty} p^2 \chi_n^2(p) dp = \hbar\omega M \left( n + \frac{1}{2} \right) = ME_n,$$

т. е. среднему значению квадрата импульса классической частицы, имеющей энергию  $E_n$ .

Волновые функции в импульсном представлении полезны для исследования поведения импульса квантового осциллятора или, например, для вычисления возмущения, вызванного членами, зависящими от  $p$ . Согласно (2.6.24), волновые функции в координатном и импульсном представлениях тесно связаны между собой, будучи преобразованиями Фурье друг друга:

$$\chi_n(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \varphi_n(x) dx. \quad (12.3.21)$$

Это равенство легко проверить, обратившись к интегральному представ-

лению функций Вебера (с другой стороны, оно само немедленно приводит к интересному интегральному уравнению, которому удовлетворяют полиномы Эрмита).

**Связанные и свободные состояния.** Если потенциальная энергия имеет минимум, но стремится асимптотически к конечному значению при  $x \rightarrow +\infty$  или  $-\infty$ , то некоторые допустимые значения энергии будут дискретны — они соответствуют состояниям, в которых частица связана в потенциальной долине. Для области значений энергии, более высоких, чем асимптотическое значение потенциала, допустимы все энергии, поскольку

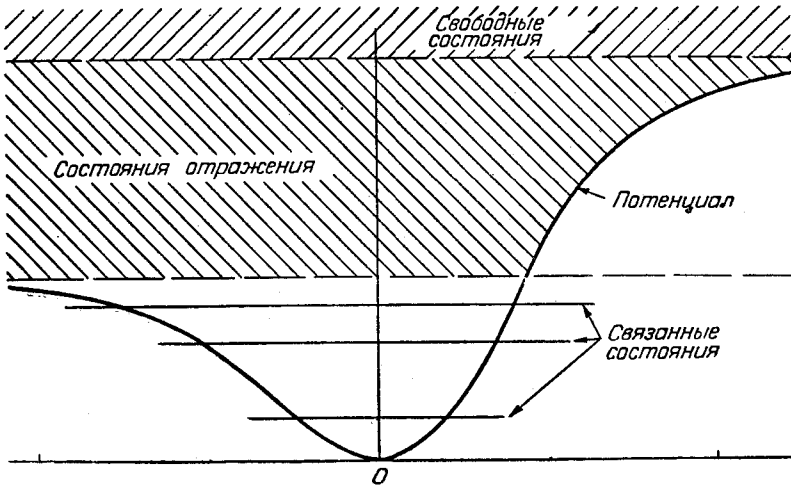


Рис. 12.2. Потенциальная энергия для одномерного случая и уровни энергии связанных состояний, состояний отражения и свободных состояний.

частица при этом свободна и может перемещаться бесконечно далеко. В качестве примера мы вычислим волновые функции и допустимые энергии для частицы массы  $m$  в потенциальном поле

$$V(x) = V_0 \operatorname{ch}^2 \mu \left\{ \operatorname{th} \left( \frac{x - \mu d}{d} \right) + \operatorname{th} \mu \right\}^2,$$

показанном на рис. 12.2. Если  $V_0$  положительно, то этот потенциал положителен и достигает наименьшего значения ( $V=0$ ) при  $x=0$ . При положительном  $x$  потенциал возрастает с возрастанием  $x$  и асимптотически стремится к  $V_0 e^{2\mu}$  при  $x \rightarrow +\infty$ ; если же  $x$  отрицательно и возрастает по абсолютной величине, то  $V$  также возрастает, асимптотически стремясь к  $V_0 e^{-2\mu}$  при  $x \rightarrow -\infty$ .

Классическая частица не может иметь отрицательной энергии; для энергий, лежащих между нулем и  $V_0 e^{-2\mu}$  ( $\mu > 0$ ), частица совершает колебания в потенциальной долине, для энергий, лежащих между  $V_0 e^{-2\mu}$  и  $V_0 e^{2\mu}$ , частица, приходящая из  $-\infty$ , отражается от потенциального барьера, находящегося правее минимума, и уходит обратно к  $-\infty$ ; при энергиях больших чем  $V_0 e^{2\mu}$  частица может двигаться от  $-\infty$  до  $+\infty$  или от  $+\infty$  до  $-\infty$ .

Чтобы найти соответствующее квантово-механическое поведение частицы, выразим расстояние в единицах  $d$ , а энергию в единицах  $\hbar^2/2md^2$ . Для состояния с энергией  $E$  уравнение для пространственного множителя ( $\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$ ) будет иметь вид

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} + \left[ \varepsilon - v \operatorname{ch} 2\mu - v \operatorname{sh} 2\mu \operatorname{th} z + v \frac{\operatorname{ch}^2 \mu}{\operatorname{ch}^2 z} \right] \psi = 0, \quad (12.3.22)$$

где

$$z = (x - \mu d)/d, \quad \varepsilon = (2md^2/\hbar^2) E, \quad v = (2md^2/\hbar^2) V_0.$$

Довольно неожиданным представляется тот факт, что это уравнение оказывается связанным с гипергеометрическим уравнением. Положим сначала

$$\psi = e^{-az} \operatorname{ch}^{-b} z F(z).$$

Тогда, если параметры  $a$  и  $b$  определяются соотношениями

$$a^2 + b^2 = -\varepsilon + v \operatorname{ch} 2\mu, \quad 2ab = v \operatorname{sh} 2\mu,$$

или

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2} \sqrt{ve^{2\mu} - \varepsilon} - \frac{1}{2} \sqrt{ve^{-2\mu} - \varepsilon} = \frac{1}{2} x_+ - \frac{1}{2} x_-, \\ b &= \frac{1}{2} \sqrt{ve^{2\mu} - \varepsilon} + \frac{1}{2} \sqrt{ve^{-2\mu} - \varepsilon} = \frac{1}{2} x_+ + \frac{1}{2} x_-. \end{aligned} \quad (12.3.23)$$

( $x_+^2$  — это разность между энергией частицы и потенциальной энергией при  $x = +\infty$ , а  $x_-^2$  — такая же разность при  $x = -\infty$ ), то уравнение для  $F$  принимает вид

$$F'' - 2[a + b \operatorname{th} z] F' + \{[v \operatorname{ch}^2 \mu - b(b+1)]/\operatorname{ch}^2 z\} F = 0,$$

что сводится к гипергеометрическому уравнению заменой независимой переменной  $u = \frac{1}{2} [1 - \operatorname{th}(z)] = e^{-z}/(e^z + e^{-z})$ :

$$u(1-u) \frac{d^2 F}{du^2} + [a + b + 1 - 2(b+1)u] \frac{dF}{du} + [v \operatorname{ch}^2 \mu - b(b+1)] F = 0.$$

Сравнение с (5.2.42) показывает, что решением, конечным при  $u = 0$  ( $x \rightarrow +\infty$ ), является гипергеометрическая функция

$$F = F\left(b + \frac{1}{2} - \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}, \quad b + \frac{1}{2} + \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} \mid a + b + 1 \mid u\right).$$

Поскольку при  $\varepsilon < ve^{2\mu}$  величина  $a + b$  действительна, функция  $\psi$  для таких энергий исчезает при  $x \rightarrow \infty$ . Вторым решением служит произведение  $u^{-a-b}$  на другое  $F$ , что приводит к  $\psi$ , которое при  $x \rightarrow \infty$  ведет себя как  $e^{(a+b)z}$  и стремится к бесконечности, если  $\varepsilon < ve^{2\mu}$ . Следовательно, до тех пор пока  $\varepsilon$  (т. е. энергия частицы в единицах  $\hbar^2/2md^2$ ) меньше чем  $ve^{2\mu}$  (асимптотическое значение потенциальной энергии при  $z \rightarrow \infty$ ) — это второе решение следует отбросить, чтобы было выполнено условие интегрируемости с квадратом.

Поэтому решением уравнения Шредингера, конечным при  $x \rightarrow \infty$ , будет

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{N e^{-az}}{(e^z + e^{-z})^b} \times \\ &\times F\left(b + \frac{1}{2} - \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}, \quad b + \frac{1}{2} + \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} \mid a + b + 1 \mid \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right), \end{aligned} \quad (12.3.24)$$

где  $z = x/d - \mu$ ,  $a$  и  $b$  определяются по формуле (12.3.23) и  $N$  — нормирующий множитель.

Согласно (5.2.49), предельное поведение этого решения при  $z \rightarrow -\infty$  будет следующим:

$$\psi \approx \frac{\Gamma(a+b+1) \Gamma(b-a) e^{(a-b)z}}{\Gamma\left(b+\frac{1}{2}-\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}\right) \Gamma\left(b+\frac{1}{2}+\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}\right)} + \\ + \frac{\Gamma(a+b+1) \Gamma(a-b) e^{(b-a)z}}{\Gamma\left(a+\frac{1}{2}-\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}\right) \Gamma\left(a+\frac{1}{2}+\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}\right)}$$

Если в последнем выражении один из членов не обращается в нуль, то оно будет стремиться к бесконечности независимо от того, будет ли  $a > b$  или  $b > a$ . В силу симметрии членов, содержащих  $a$  и  $b$ , а также симметрии определений  $a$  и  $b$  [см. уравнение (12.3.23)], мы получим всевозможные случаи, выбрав  $b > a$ ; при  $a > b$  получим простое повторение результатов. Для того чтобы при  $b > a$   $\psi$  было конечным при  $z \rightarrow -\infty$ , нужно, чтобы аргумент одной из гамма-функций, стоящих в знаменателе первого члена, был целым отрицательным числом и чтобы, таким образом, первый член был равен нулю. Это означает, что при  $\varepsilon < v e^{-2\mu}$  допустимы только те энергии, для которых

$$b = b_n = \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad a = a_n = \frac{\frac{1}{2} v \operatorname{sh} 2\mu}{\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \left(n + \frac{1}{2}\right)}, \quad (12.3.24')$$

где  $n$  — нуль или целое положительное число, такое, что  $b_n > a_n$ . Другими словами,  $n$  должно быть меньше чем

$$\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{2} v \operatorname{sh} 2\mu}.$$

Отметим, что дискретные связанные уровни не могут существовать, если  $\sqrt{\frac{1}{2} v \operatorname{sh} 2\mu}$  больше чем  $\sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$ ; иначе говоря, если не выполняется неравенство

$$v > e^{2\mu} \operatorname{th} \mu, \quad \mu > 0,$$

то связанных уровней нет вовсе. Если потенциальная энергия становится слишком асимметричной ( $\mu$  слишком велико), то минимум уже не сможет «поддерживать» связанное состояние. Однако внутри этих границ для  $v$  и  $\mu$  возможны одно или несколько состояний, волновые функции которых исчезают и при  $x = +\infty$  и при  $x = -\infty$  и которые соответствуют классическим связанным состояниям, где частица колеблется с конечной амплитудой около положения минимума потенциала, совершая периодическое (но не чисто гармоническое) движение. В классическом случае частота колебания зависит от амплитуды движения и равна  $\sqrt{V_0/2\pi^2 m d^2 \operatorname{ch}^2 \mu}$  для малых амплитуд, но для больших амплитуд эта частота уменьшается. В волновой механике признаком того, что движение не будет чисто гармоническим, является отличие друг от друга промежутков между допустимыми уровнями энергии, тогда как в случае простого параболического потенциала эти промежутки были одинаковы.

**Существование связанных состояний.** Мы уже видели, что внутри определенных границ для величин  $\mu$  и  $v$  допустимые уровни энергии при

$\varepsilon < v e^{-2\mu}$  являются дискретными величинами

$$\varepsilon_n = v \operatorname{ch} 2\mu - \left[ \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 - \frac{(1/4) v^2 \operatorname{sh}^2 2\mu}{\left[ \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^2}, \quad (12.3.25)$$

где

$$n = 0, 1, 2, \dots < \left[ \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{2} v \operatorname{sh} 2\mu} \right].$$

Соответствующие волновые функции имеют вид

$$\psi_n = \frac{N e^{-a_n z}}{(e^z + e^{-z})^{b_n}} F \left( -n, 2 \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}} - n \mid a_n + b_n + 1 \mid \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \right), \quad (12.3.26)$$

где величины  $a_n$  и  $b_n$  определены равенствами (12.3.24').

При малых значениях  $v$  существует только один связанный уровень. Например, при  $\mu = 0$  (потенциальная долина, симметричная относительно  $x = 0$ ) и при  $v \ll \frac{1}{4}$  существует только одно связанное состояние для  $n = 0$ . Допустимая энергия с точностью до величин второго порядка относительно малой величины  $v$  равна:

$$\varepsilon \simeq v - v^2, \quad E \simeq V_0 - \frac{2md^2}{\hbar^2} V_0^2.$$

Этот уровень только немного ниже асимптотического значения  $V_0$  потенциальной энергии, и соответствующее состояние является «едва связанным».

Вообще, можно показать, что в случае, когда  $V$  равно нулю для всех значений  $x$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ , кроме малого промежутка, где имеется очень неглубокая «долина», всегда существует по крайней мере один связанный уровень. В случае когда  $E$  меньше нуля, но больше минимума  $V$  в этой долине, в области, где  $E > V$ , волновая функция будет изогнута вниз, и мы можем добиться того, что она будет опускаться к оси в обоих концах промежутка изменения  $x$ , где  $E > V$ . В области, где  $V = 0$ ,  $E$  будет меньше чем  $V$ , и решение ведет себя там как  $e^{-\alpha x}$  при  $x \rightarrow \infty$  и как  $e^{\alpha x}$  при  $x \rightarrow -\infty$  с тем, чтобы  $\psi$  было конечным:  $\alpha^2 = -(2mE/\hbar^2)$  ( $E < 0$ ). Как бы ни были «мелки» значения  $V$  и как бы низко ни проходила соответствующая кривая графика  $\psi$  в этой области, всегда можно сделать  $\alpha$  достаточно малым [взяв  $-E$  малым, т. е. взяв «едва связанное» состояние], для того чтобы две экспоненты, дающие решения для больших значений  $x$ , соединились достаточно гладко.

Таким образом, как бы мелка ни была потенциальная долина, в этом случае существует всегда по крайней мере один связанный уровень. Этот вывод, однако, перестает быть правильным, если асимптотическое значение  $V$  при  $x \rightarrow \infty$  отличается от асимптотического значения при  $x \rightarrow -\infty$ . В этом случае мы не можем подправить  $E$  таким образом, чтобы разность производных показательных членов, представляющих  $\psi$  при больших значениях  $|x|$ , была достаточно малой. Эти общие выводы иллюстрируются в настоящем примере, где мы видели, что при  $\mu = 0$  и  $V(+\infty) = V(-\infty)$  всегда существует один связанный уровень, как бы мало ни было  $v$ ; в то же время при  $\mu \neq 0$  и  $V(+\infty) \neq V(-\infty)$  не существует связанного уровня, если  $v$  меньше, чем  $e^{2\mu} \operatorname{th} \mu$ .

Нужно попутно отметить, что эти выводы сохраняют силу только для одномерных задач. В случае двух или трех измерений, когда  $V$  равно нулю всюду, кроме малой области вблизи начала, где  $V$  имеет численно небольшой минимум, можно сделать эту область настолько малой или



выбрать минимум численно настолько малым (или и то и другое вместе), что не будет существовать ни одного связанного уровня<sup>1)</sup>.

С другой стороны, при больших значениях  $v \text{ch}^2 \mu$  существует несколько связанных уровней. Вблизи минимума потенциала, находящегося в точке  $x = 0$ , потенциальная энергия имеет параболический характер:

$$V(x) \simeq \left(\frac{x}{d}\right)^2 V_0 \text{ch}^{-2} \mu + \dots, \quad x \ll d,$$

так что классическая частота малых колебаний около положения равновесия равна  $\omega/2\pi$ , где  $\omega = \sqrt{2V_0/md^2 \text{ch}^2 \mu}$ . Следовательно, постоянная  $v$  связана с  $\omega$  соотношением

$$v = \frac{m^2 d^4}{\hbar^2} \omega^2 \text{ch}^2 \mu.$$

Если  $v \text{ch}^2 \mu$  значительно (превышает  $\frac{1}{4}$ , правая часть уравнения (12.3.25) для энергии может быть разложена в ряд при малых значениях  $n$ , что дает нам

$$E_n \simeq \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2}{2md^2} \left(1 + \frac{3}{2} \text{th}^2 \mu\right) \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots$$

для нижних уровней. Таким образом, несколько первых связанных уровней соответствуют формуле (12.3.6) для гармонического осциллятора с поправочным членом, соответствующим отклонению рассматриваемой потенциальной энергии от простой параболической формы.

**Отражение и прохождение.** Если энергия  $\varepsilon$  больше чем  $v e^{-2\mu}$ , но меньше чем  $v e^{2\mu}$ , то оба решения конечны при  $x \rightarrow -\infty$ , но только одно из них конечно при  $x \rightarrow +\infty$ . Функция, данная в равенстве (12.3.24), конечна всюду для всякой энергии в промежутке  $v e^{-2\mu} < \varepsilon < v e^{2\mu}$ . В этом промежутке величина  $\kappa_+ = \sqrt{v e^{2\mu} - \varepsilon}$  будет действительной, а величина  $\sqrt{v e^{-2\mu} - \varepsilon} = -ik_-$  мнимой;  $k_-^2$  дает асимптотическое значение кинетической энергии частицы в единицах  $\hbar^2/2md^2$  при  $x \rightarrow -\infty$ . Точное выражение волновой функции при  $v e^{2\mu} > \varepsilon > v e^{-2\mu}$  имеет тогда вид

$$\psi = \frac{N e^{-\frac{1}{2}(\kappa_+ + ik_-)z}}{(e^z + e^{-z})^{\frac{1}{2}\kappa_+ - \frac{1}{2}ik_-}} F\left(b + \frac{1}{2} - \gamma, b + \frac{1}{2} + \gamma \mid \kappa_+ + 1 \mid \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right), \quad (12.3.27)$$

где

$$b = \frac{1}{2} \kappa_+ - \frac{1}{2} ik_- \quad \text{и} \quad \gamma = \sqrt{v \text{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}.$$

Воспользовавшись уравнением (5.2.49), мы найдем асимптотическое поведение функции  $\psi$  при  $x \rightarrow -\infty$ :

$$\psi \simeq N \Gamma(\kappa_+ + 1) \left\{ \frac{\Gamma(-ik_-) e^{ik_- z}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} \kappa_+ + \frac{1}{2} - \gamma - \frac{1}{2} ik_-\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} \kappa_+ + \frac{1}{2} + \gamma - \frac{1}{2} ik_-\right)} + \frac{\Gamma(ik_-) e^{-ik_- z}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} \kappa_+ + \frac{1}{2} - \gamma + \frac{1}{2} ik_-\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} \kappa_+ + \frac{1}{2} + \gamma + \frac{1}{2} ik_-\right)} \right\}.$$

Первый член соответствует стационарному потоку частиц с импульсом  $p_- = \sqrt{2m(E - V_0 e^{-2\mu})}$ , движущихся в положительном направлении. Как показывает равенство (12.3.3), этот поток с точки зрения волновой

<sup>1)</sup> Для двумерного случая это последнее утверждение не справедливо. См. Ландау Л., Лифшиц Е., Квантовая механика, ч. I, ГИТТЛ, М.—Л., 1948, стр. 183—186. — Прим. ред.

механики изображается чисто гармонической волной

$$\exp\left(\frac{ip_x}{\hbar}\right) = \exp[i(z + \mu) \sqrt{\varepsilon - ve^{-2\mu}}] = \exp[ik_-(z + \mu)];$$

квадрат модуля коэффициента при этой показательной функции пропорционален плотности потока частиц в положительном направлении. Второй член, очевидно, соответствует волне (а следовательно, и потоку частиц), движущейся в отрицательном направлении. Так как коэффициент при втором члене является комплексным числом, сопряженным коэффициенту при первом члене, оба потока равны по величине, и результирующий поток равен нулю. Как и в случае классических частиц, поток, распространяющийся вправо, не может достигнуть  $+\infty$ , так как потенциальная энергия  $V_0 e^{2\mu}$  там больше, чем энергия частицы, так что все частицы отражаются обратно к  $-\infty$ .

Если энергия  $\varepsilon$  больше чем  $ve^{2\mu}$  (в единицах  $\hbar^2/2md^2$ ), то величина  $\sqrt{ve^{2\mu} - \varepsilon} = -ik_+$  будет также мнимой и все решения уравнения (12.3.22) конечны и при  $x = \infty$ , и при  $x = -\infty$ . Решение (12.3.24) в этом промежутке ( $\varepsilon > ve^{2\mu}$ ),

$$\begin{aligned} \phi &= Ne^{\frac{1}{2}i(k_+ - k_-)z} (e^z + e^{-z})^{\frac{1}{2}i(k_+ + k_-)} \times \\ &\times F\left(-\frac{1}{2}ik_+ - \frac{1}{2}ik_- + \frac{1}{2} - \gamma, -\frac{1}{2}ik_+ - \frac{1}{2}ik_- + \frac{1}{2} + \gamma \mid 1 - ik_+ \mid \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \simeq \\ &\simeq Ne^{ik_+z}, \quad z \rightarrow +\infty, \end{aligned} \quad (12.3.28)$$

$$\begin{aligned} \phi &\simeq N\Gamma(1 - ik_+) \left\{ \frac{\Gamma(-ik_-) e^{ik_-z}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \gamma - \frac{1}{2}ik_+ - \frac{1}{2}ik_-\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \gamma - \frac{1}{2}ik_+ - \frac{1}{2}ik_-\right)} + \right. \\ &\left. + \frac{\Gamma(ik_-) e^{-ik_-z}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \gamma - \frac{1}{2}ik_+ + \frac{1}{2}ik_-\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \gamma - \frac{1}{2}ik_+ + \frac{1}{2}ik_-\right)} \right\}, \quad z \rightarrow -\infty, \end{aligned}$$

где  $\gamma = \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}$  и  $k_- = \sqrt{\varepsilon - ve^{-2\mu}}$ , представляет поток частиц, одни из которых движутся вправо, а другие — влево при  $z \rightarrow -\infty$ ; но при  $z \rightarrow +\infty$  частицы движутся только вправо. Это не согласуется с классической механикой, так как в классической механике все частицы, движущиеся из  $-\infty$  с энергией, большей потенциальной энергии в любой точке промежутка  $-\infty < x < +\infty$ , будут продолжать двигаться только вправо. Однако это согласуется с движением волны в среде, коэффициент преломления которой пропорционален  $E - V$ ; если коэффициент преломления меняется с изменением  $x$  в промежутке  $-\infty < x < +\infty$ , то часть волны, движущейся из  $-\infty$  вправо, отразится назад к  $-\infty$  и только часть волны будет проходить к  $+\infty$ .

Сравнительные амплитуды проходящей и отраженной волн получаются с помощью формулы  $\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \pi/\sin \pi z$ . Например, квадрат модуля коэффициента при  $e^{ik_-z}$  содержит множитель  $\Gamma(1 - ik_+) \Gamma(1 + ik_+) = \pi k_+ / \operatorname{sh} \pi k_+$ , а также и множитель  $\Gamma(ik_-) \Gamma(-ik_-) = \pi/k_- \operatorname{sh} \pi k_-$ . Поступая аналогично с гамма-функциями в знаменателе и помня, что плотность тока пропорциональна произведению величины  $k$  на квадрат амплитуды экспоненты, мы найдем, что падающий поток (движущийся вправо из  $x = -\infty$ ), отраженный поток (влево к  $x = -\infty$ ) и проходящий поток (вправо к  $x = +\infty$ ) соответственно пропорциональны величинам  $I_i, I_r$

и  $I_t$ , где:

$$\begin{aligned} I_i &= \frac{1}{2} k_+ |N|^2 \frac{\operatorname{ch}[\pi(k_+ + k_-)] + \cos(2\pi\gamma)}{\operatorname{sh}(\pi k_+) \operatorname{sh}(\pi k_-)}, \\ I_r &= \frac{1}{2} k_+ |N|^2 \frac{\operatorname{ch}[\pi(k_- - k_+)] + \cos(2\pi\gamma)}{\operatorname{sh}(\pi k_+) \operatorname{sh}(\pi k_-)}, \\ I_t &= k_+ |N|^2. \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что  $I_i - I_r = I_t$ , как и должно быть, для того чтобы удовлетворялось уравнение непрерывности.

Поэтому, если из точки  $x = -\infty$  выходит поток, плотность которого равна 1, то отраженный поток  $R$  и проходящий поток  $T$  имеют плотности

$$\begin{aligned} R &= \frac{\operatorname{ch}[\pi(k_- - k_+)] + \cos(2\pi\gamma)}{\operatorname{ch}[\pi(k_- + k_+)] + \cos(2\pi\gamma)}, \\ T &= \frac{2\operatorname{sh}(\pi k_+) \operatorname{sh}(\pi k_-)}{\operatorname{ch}[\pi(k_+ + k_-)] + \cos(2\pi\gamma)} = 1 - R, \end{aligned} \quad (12.3.29)$$

где

$$\gamma = \sqrt{v \operatorname{ch}^2 \mu + \frac{1}{4}}, \quad k_+ = \sqrt{\varepsilon - v e^{2\mu}} \quad \text{и} \quad k_- = \sqrt{\varepsilon - v e^{-2\mu}}.$$

Когда энергия  $\varepsilon$  приближается к асимптотическому значению  $v e^{2\mu}$ ,  $k_+$  стремится к нулю,  $T$  стремится к нулю, а  $R$  стремится к единице. Когда  $v$  приближается к нулю, так что потенциал становится независимым от  $x$ ,  $R$  стремится к нулю, а  $T$  стремится к единице (для положительного  $\varepsilon$ ).

Другое интересное явление лучше всего показать, рассматривая симметричный случай  $\mu = 0$ . Здесь допустимые связанные уровни имеют вид:

$$\varepsilon_n = v - \left[ \sqrt{v + \frac{1}{4}} - \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]^2, \quad n = 0, 1, \dots < \sqrt{v + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2},$$

и «коэффициент отражения» от потенциальной долины падающей частицы с энергией  $\varepsilon > 0$  равен

$$R = \frac{1 + \cos\left(2\pi \sqrt{v + \frac{1}{4}}\right)}{\operatorname{ch}\left(2\pi \sqrt{\varepsilon - v}\right) + \cos\left(2\pi \sqrt{v + \frac{1}{4}}\right)} = 1 - T.$$

Заметим, что этот коэффициент меняется периодически с изменением  $\sqrt{v + \frac{1}{4}}$ , достигая своего максимума, когда  $\sqrt{v + \frac{1}{4}}$  является целым числом, и обращаясь в нуль при  $\sqrt{v + \frac{1}{4}} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, N + \frac{1}{2}$ . В этом последнем случае отдельные волны, отраженные от различных частей потенциальной долины, интерферируя, разрушают отраженную волну и приводят к полному прохождению. Это полностью аналогично действию пленки, толщина которой равна четверти длины волны; такая пленка, нанесенная на поверхность линзы, уменьшает до минимума свет, отражаемый от этой поверхности.

Но, как и во всех квантовых явлениях, здесь мы имеем лишь частичное объяснение явления. Если  $\sqrt{v + \frac{1}{4}}$  несколько больше чем  $N + \frac{1}{2}$ , то существует связанный уровень  $\varepsilon_N$ , несколько более низкий чем высшая точка склона долины, и при уменьшении  $v$  до значений, несколько меньших чем  $\left(N + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}$ , этот верхний связанный уровень «выталкивается» в континуум свободных уровней, лежащих выше  $\varepsilon = v$ . Если  $v$

приближенно равно  $(N + \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4}$ , то оказывается, что волновая функция (при  $\epsilon$ , несколько большем чем  $\nu$ ) в потенциальной долине имеет значения, во много раз большие чем при  $|x| = \infty$ ; в то же время при  $\nu \approx N^2 - \frac{1}{4}$  амплитуда этой функции в долине мало отличается от ее амплитуды при  $|x| \rightarrow \infty$ . Медленно движущаяся частица, подходя к долине, входит в нее с энергией, очень близкой к энергии связанного состояния; даже в случае, когда она находится в свободном состоянии, она пребывает в долине сравнительно долгое время и, очевидно, «забывает» отразиться. В случае когда  $\nu$  несколько меньше чем  $(N + \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4}$  и связанный уровень «выталкивается», кажется, что существует «виртуальный уровень», который задерживает приходящие медленные частицы на некоторое время и лишь некоторые из них отбрасывает назад к  $-\infty$ .

Это влияние «виртуальных уровней» на отражающую способность потенциальной ямы встречается также и в задачах двух и трех измерений.

Мы рассмотрели поведение волновой функции для потенциала, фигурирующего в уравнении (12.3.22), при всех значениях энергии. Мы видели, что не существует допустимых состояний энергии, меньших чем минимум потенциальной энергии, что согласуется с классической динамикой. Для энергий, лежащих между минимумом потенциала и наименьшим асимптотическим значением  $V_-$ , допустимые состояния являются связанными, волновая функция обращается в нуль при  $x = \pm\infty$ , что согласуется с классическими результатами; но в этом промежутке допустима только дискретная совокупность значений энергии, что не согласуется с классическим случаем, где допустимы все значения энергии, превышающие минимум. Для частиц с энергией, большей чем  $V_-$ , но меньшей чем асимптотическое значение  $V_+$  потенциала при  $x = +\infty$ , допустимы все значения энергии; волновая функция равна нулю при  $x = +\infty$ , но простирается до  $-\infty$ , где она соответствует падающей волне (распространяющейся вдоль оси  $x$ ) и отраженной волне равной амплитуды, что находится в соответствии с классическим описанием потока частиц, отражающихся от склона потенциальной долины. Наконец, для частиц с энергиями, превышающими  $V_+$ , допустимы все энергии в согласии с классическим случаем, но здесь встречается отражение волны от склонов долины, что противоречит поведению классической частицы, для которой при такой большой энергии отражение невозможно. Волновыми функциями такого рода являются функции, указанные в равенстве (12.3.28) и соответствующие пучку, падающему из  $-\infty$ , пучку, проходящему к  $+\infty$ , и пучку, отраженному назад к  $-\infty$ , или, наоборот, соответствующие пучку, падающему из  $+\infty$ , пучку, проходящему к  $-\infty$ , и пучку, отраженному назад к  $+\infty$ . Обе эти волновые функции конечны во всем промежутке  $-\infty < x < +\infty$ , но не стремятся к нулю в его обеих граничных точках.

**Проникновение через потенциальный барьер.** Ту же самую потенциальную энергию можно «перевернуть», переменяя знаки  $V_0$  и  $\mu$ ; тогда получим поле с асимптотическим значением  $-\nu e^{2\mu}$  (в единицах  $\hbar^2/2md^2$ ) при  $x \rightarrow -\infty$ , имеющее значение нуль при  $x = 0$  и асимптотическое значение  $-\nu e^{-2\mu}$  при  $x \rightarrow \infty$ . В классической теории частицы, имеющие энергию, большую чем вершина барьера ( $\epsilon > 0$ ), все будут проходить над барьером, двигаясь от  $-\infty$  к  $+\infty$ , а частицы, двигающиеся от  $-\infty$  к  $+\infty$  с энергией, меньшей чем это высшее значение, все будут отражаться назад к  $-\infty$ . Основываясь на наших прежних рассуждениях, мы можем ожидать, что в квантовой механике при  $\epsilon > 0$  произойдет частичное отра-

жение. Интересно посмотреть, происходит ли прохождение через потенциальный барьер частиц с отрицательной энергией.

Уравнение, определяющее волновую функцию в случае, когда потенциальная энергия имеет вид  $-v \operatorname{ch}^2 \mu (\operatorname{th} z - \operatorname{th} \mu)^2$  и при  $z = x/d + \mu$ , принимает форму

$$\frac{d^2 \psi}{dz^2} + [\varepsilon + v \operatorname{ch} 2\mu - v \operatorname{sh} 2\mu \operatorname{th} z - v \operatorname{ch}^2 \mu \operatorname{ch}^{-2} z] \psi = 0,$$

что можно сравнить с (12.3.22). Методами, подобными рассмотренным ранее, мы получаем при  $\varepsilon > -ve^{-2\mu}$  решение, которое представляет пучок, проходящий к  $+\infty$ , а также падающий пучок и пучок, отраженный к  $-\infty$ :

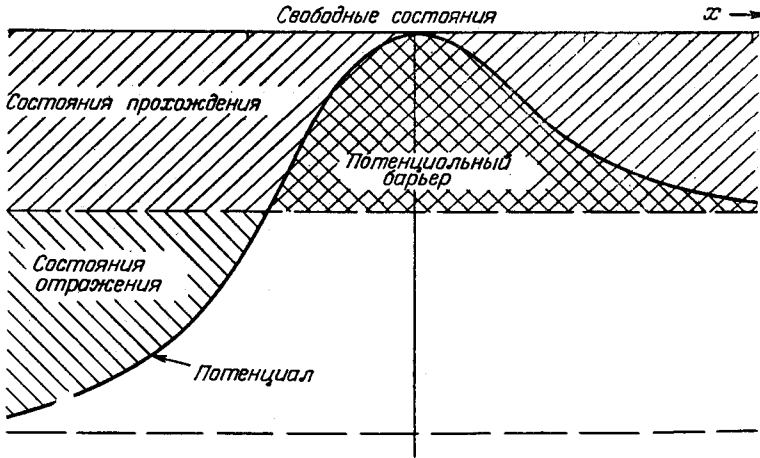


Рис. 12.3. Потенциальная функция, допускающая прохождение волн через потенциальный барьер.

$$\begin{aligned} \psi &= N e^{\frac{1}{2} i (k_+ + k_-) z} (e^z + e^{-z})^{\frac{1}{2} i (k_+ - k_-) z} \times \\ &\times F\left(\frac{1}{2} + i \frac{k_- - k_+ + \beta}{2}, \frac{1}{2} + i \frac{k_- - k_+ - \beta}{2} \mid 1 - ik_+ \mid \frac{e^{-z}}{e^z + e^{-z}}\right) \simeq N e^{ik_+ z}, \quad z \rightarrow \infty, \\ \psi &\simeq \frac{N \Gamma(1 - ik_+) \Gamma(-ik_-) e^{ik_- z}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i \frac{k_+ + k_- + \beta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - i \frac{k_+ + k_- - \beta}{2}\right)} + \\ &+ \frac{N \Gamma(1 - ik_+) \Gamma(ik_-) e^{-ik_- z}}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i \frac{k_- - k_+ + \beta}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + i \frac{k_- - k_+ - \beta}{2}\right)}, \quad z \rightarrow -\infty, \quad (12.3.30) \end{aligned}$$

где

$$\beta = \sqrt{4v \operatorname{ch}^2 \mu - 1}, \quad k_+ = \sqrt{\varepsilon + ve^{-2\mu}}, \quad k_- = \sqrt{\varepsilon + ve^{2\mu}}.$$

Величина  $k_+^2$  является кинетической энергией частицы, когда она находится в  $x = +\infty$ ,  $k_-^2$  является ее кинетической энергией в  $x = -\infty$ . Обе эти величины положительны ( $k_+$  и  $k_-$  действительны), если только  $\varepsilon$  больше чем  $-ve^{-2\mu}$ . Это решение всюду конечно, если только  $k_+$  и  $k_-$  действительны.

Оперирова с гамма-функциями так же, как и раньше, мы видим, что в случае, когда решение нормировано и представляет падающий поток частиц, движущихся из  $-\infty$ , причем интенсивность потока равна единице, поток  $T$ , проходящий к  $+\infty$ , и поток  $R$ , отраженный

назад к  $-\infty$ , для всех значений  $\varepsilon$ , для которых  $k_+$  и  $k_-$  действительны, имеют вид:

$$T = \frac{2 \operatorname{sh}(\pi k_+) \operatorname{sh}(\pi k_-)}{\operatorname{ch}[\pi(k_- + k_+)] + \operatorname{ch}(\pi\beta)}, \quad (12.3.31)$$

$$R = \frac{\operatorname{ch}[\pi(k_- - k_+)] + \operatorname{ch}(\pi\beta)}{\operatorname{ch}[\pi(k_- + k_+)] + \operatorname{ch}(\pi\beta)} = 1 - T.$$

Эти выражения указывают на то, что при каждом значении  $\varepsilon$ , большем чем  $-ve^{-2\mu}$ , некоторая часть потока проходит к  $+\infty$ , а некоторая часть отражается к  $-\infty$ . Это не согласуется с результатами классической механики, где при  $\varepsilon > 0$  не будет отражения, а при  $\varepsilon < 0$  (в случае, когда частица «проникает» через потенциальный барьер при  $x=0$ , направляясь

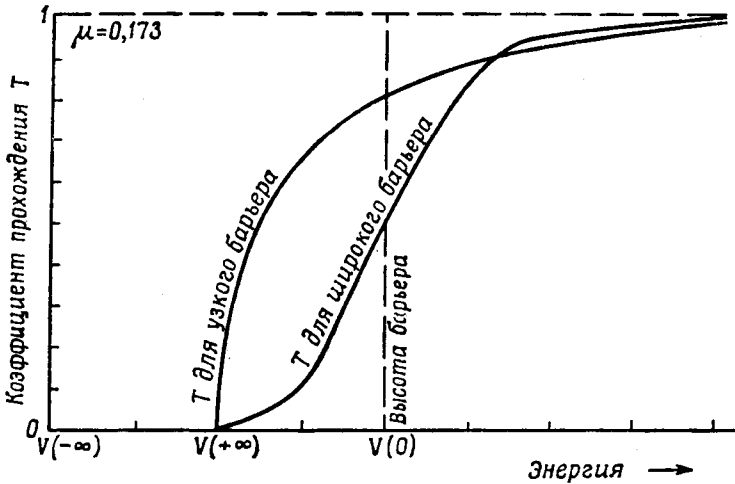


Рис. 12.4. Прохождение частиц через потенциальный барьер, изображенный на рис. 12.3.

к  $x = \infty$ ), не будет прохождения. В предельных случаях результаты квантовой механики приближаются к классическим: при  $\varepsilon \gg v k_+$  и  $k_-$  велики и приблизительно равны друг другу; в этом случае  $T$  близко к единице, а  $R$  близко к нулю. С другой стороны, если  $v$  и (или)  $\mu$  велики, а  $\varepsilon$  отрицательно (меньше, чем высшая точка барьера), то  $k_+$ , хотя и действительно, но значительно меньше чем  $k_-$  или  $\beta$ ; в этом случае  $T$  мало, а  $R$  близко к единице. Чем выше и «шире» потенциальный барьер, тем меньше частиц проходит через него. Тем не менее наши результаты показывают, что потенциальный барьер конечной высоты и ширины не препятствует небольшой части ударяющихся об него частиц проникать через него и появляться с другой его стороны. Это поведение существенно, например, для объяснения явления радиоактивности. График коэффициента прохождения  $T$  как функции от энергии частицы  $\varepsilon$  дан на рис. 12.4 и указывает общие результаты.

При  $\varepsilon < -ve^{-2\mu}$  величина  $k_+$  мнимая, и мы можем ее обозначить через  $ix_+$ . В этом случае  $\phi$  обращается в нуль при  $x = +\infty$ , и коэффициенты падающей и отраженной к  $x = -\infty$  волн имеют одну и ту же величину, что указывает на полное отражение. Потенциальный барьер для этих значений энергии простирается до  $+\infty$ , так что отражение будет полным. Наконец, при  $\varepsilon < -ve^{2\mu}$  нельзя найти всюду конечные решения, так что такие энергии не являются допустимыми.

**Центральные силовые поля, момент количества движения.** Если частица массы  $M$  находится в потенциальном поле  $V(r)$ , являющемся

центрально-симметричным относительно некоторой точки (которая может быть принята за начало), соответствующее уравнение Шредингера при постоянной энергии  $E$  имеет вид:

$$\nabla^2\psi + [\varepsilon - v(r)]\psi = 0,$$

где  $\varepsilon = 2ME/\hbar^2$  и  $v = 2MV/\hbar^2$ ; в этом уравнении переменные разделяются, если перейти к сферическим координатам  $r, \vartheta, \varphi$ . Множитель, зависящий от углов, является обычной сферической гармоникой:

$$\psi = \frac{1}{r} X_l^m(\vartheta, \varphi) R(r), \quad X_l^m = e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta), \quad (12.3.32)$$

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l, \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

где собственные функции  $P_l^m$  приведены в таблице, помещенной в конце гл. 10. Уравнение для радиального множителя имеет вид

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left[ \varepsilon - \frac{l(l+1)}{r^2} - v(r) \right] R = 0, \quad (12.3.33)$$

где, для того чтобы  $\psi$  всюду было конечным,  $R$  должно стремиться к нулю при  $r \rightarrow 0$  и должно оставаться конечным при  $r \rightarrow \infty$ .

Мы видим, что энергия не зависит от квантового числа  $m$ , так как это число не содержится в уравнении для  $R$  и  $\varepsilon$ . Это вырождение соответствует симметрии потенциального поля, а различные комбинации волновых функций при различных значениях  $m$  определяют различные ориентации волны относительно полярной оси [см., например, рассуждения по поводу формулы (10.3.36)]. В классическом случае эта симметрия приводит, очевидно, к постоянству момента количества движения частицы относительно силового центра и к постоянству направления момента количества движения. Это постоянство может быть переведено и на язык квантовой механики.

Момент количества движения  $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$  частицы относительно начала соответствует оператору [см. равенства, предшествующие (1.6.42), и (2.6.17), а также стр. 432]

$$\mathcal{M} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{r} \times \text{grad} = \frac{\hbar}{i} \left[ \mathbf{a}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\mathbf{a}_\vartheta}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left[ \mathbf{a}_z \frac{\partial}{\partial \varphi} - \mathbf{a}_x \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos \varphi \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \mathbf{a}_y \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \sin \varphi \text{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right].$$

Компонента вдоль полярной оси  $\mathcal{M}_z = (\hbar/i)(\partial/\partial\varphi)$  является компонентой, для которой  $\psi$  служит собственной функцией, так как

$$\mathcal{M}_z X_l^m = m \hbar X_l^m,$$

если множитель функции  $\psi$ , зависящий от  $\varphi$ , имеет вид  $e^{im\varphi}$ . Волновая функция не является собственной функцией для  $\mathcal{M}_x$  или для  $\mathcal{M}_y$ , так как ни один из этих операторов, действуя на  $\psi$ , не приводит к произведению  $\psi$  на постоянную. Как мы видели в (1.6.43) и как можно доказать с помощью свойств сферических гармоник,

$$(\mathcal{M}_x + i\mathcal{M}_y) X_l^m = \hbar X_l^{m+1}, \quad (\mathcal{M}_x - i\mathcal{M}_y) X_l^m = \hbar(l+m)(l-m+1) X_l^{m-1}, \quad (12.3.34)$$

так что операторы  $\mathcal{M}_x + i\mathcal{M}_y$  и  $\mathcal{M}_x - i\mathcal{M}_y$  повышают или понижают квантовое число  $m$  и своим действием изменяют волновую функцию.

Наконец, для оператора, соответствующего квадрату момента коли-

чества движения,  $\psi$  является собственной функцией:

$$\begin{aligned} (\mathcal{M}_x^2 + \mathcal{M}_y^2 + \mathcal{M}_z^2) X_l^m &= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] X_l^m = \\ &= \left[ \mathcal{M}_z^2 + \frac{1}{2} (\mathcal{M}_x + i\mathcal{M}_y)(\mathcal{M}_x - i\mathcal{M}_y) + \frac{1}{2} (\mathcal{M}_x - i\mathcal{M}_y)(\mathcal{M}_x + i\mathcal{M}_y) \right] X_l^m = \\ &= \hbar^2 l(l+1) X_l^m. \end{aligned}$$

Таким образом, можно сказать, что, перейдя к сферическим координатам и выразив в них волновую функцию, а также считая, что зависимость от углов имеет вид  $X_l^m$ , мы тем самым удовлетворяем требованию, чтобы волновые функции были собственными функциями квадрата момента количества движения и составляющей момента количества движения вдоль полярной оси, помимо того, что они являются собственными функциями оператора полной энергии. Мы могли бы, конечно, воспользоваться и другими комбинациями сферических гармоник, такими, например, как  $Y_{ml}^e = \cos(m\varphi) P_l^m$  или  $Y_{ml}^o = \sin(m\varphi) P_l^m$ , но эти комбинации не являются собственными функциями компоненты оператора  $\mathcal{M}$  по оси  $z$ , а поэтому мы предпочитаем комплексные функции  $X_l^m$ .

**Центральные силовые поля, радиальное уравнение.** Так как очень многие задачи квантовой механики связаны с центральными силовыми полями или с полями, очень мало отличающимися от центральных, то полезно рассмотреть некоторые случаи, в которых можно найти точные решения, чтобы потом использовать их как основу для вычисления возмущений в других задачах. Один из случаев, когда можно найти точное решение, соответствует гармоническому осциллятору  $V = \frac{1}{2} M\omega^2 r^2$ , где  $\omega/2\pi$  — классическая частота колебаний. Соответствующее уравнение для  $R$  показывает, что  $R$  пропорционально вырожденной гипергеометрической функции от  $r^2$ , которая стремится к бесконечности при  $r \rightarrow \infty$ , если только ни один из индексов не равен целому отрицательному числу; в последнем случае решением является один из *полиномов Лагерра*, таблица которых дана в конце гл. 6,

$$R(r) = N r^{l+1} e^{-\frac{1}{2}\beta r^2} L_k^{l+\frac{1}{2}}(\beta r^2), \quad k=0, 1, 2, \dots,$$

где  $\beta$ , как и раньше, равно  $M\omega/\hbar$ , а полином Лагерра  $L_n^a(z)$  обладает следующими свойствами:

$$\frac{d^2}{dz^2} L_n^a + \left( \frac{a+1}{z} - 1 \right) \frac{d}{dz} L_n^a + \frac{n}{z} L_n^a = 0, \quad (12.3.35)$$

$$L_n^a(z) = \frac{[\Gamma(n+a+1)]^2}{n! \Gamma(a+1)} F(-n | a+1 | z) \simeq \frac{\Gamma(n+a+1)}{n!} (-z)^n, \quad z \rightarrow \infty,$$

$$\int_0^\infty z^a e^{-z} L_m^a(z) L_n^a(z) dz = \delta_{mn} \frac{[\Gamma(n+a+1)]^3}{n!},$$

$$\int_0^\infty z^{a+1} e^{-z} L_m^a(z) L_n^a(z) dz = \delta_{mn} [\Gamma(n+a+1)]^3 \frac{2n+a+1}{n!}.$$

Только для значений  $n=0, 1, 2, \dots$  вырожденный гипергеометрический ряд имеет конечное число членов, а  $R$  остается конечным при  $r \rightarrow \infty$ . Это ограничивает допустимые значения энергии  $E = (\hbar^2/2M)\varepsilon$  только следующими дискретными уровнями:

$$E_n = \hbar\omega \left( 2k + l + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 2k + l + 1 = 1, 2, 3, \dots \quad (12.3.36)$$



Расстояния между этими уровнями равны  $\hbar\omega$ , как и в случае линейного гармонического осциллятора, описываемого формулой (12.3.6); но в данном случае наименьший уровень на  $\frac{3}{2}\hbar\omega$  больше минимума потенциала, тогда как в одномерном случае наименьший уровень только на  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  выше минимума (для двумерного гармонического осциллятора этот уровень будет на  $\hbar\omega$  больше минимума).

Соответствующей нормированной собственной функцией в случае потенциала гармонического осциллятора является

$$\psi_{mln}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\beta^3 \frac{2l+1}{4\pi(2n+1)} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{\left(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}l - \frac{1}{2}\right)!}{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}n + \frac{1}{2}l + 1\right)\right]^3}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta) \times (\beta r^2)^{\frac{1}{2}l} e^{-\frac{1}{2}\beta r^2} L_{\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}l - \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}}(\beta r^2), \quad (12.3.37)$$

$$l = n - 1, n - 3, n - 5, \dots, 1 \text{ или } 0,$$

$$m = 0, 1, 2, \dots, l, \quad \beta = \frac{M\omega}{\hbar},$$

или функция, ей комплексно сопряженная. Мы видим, что каждый уровень вырожден; здесь  $m$  для каждого значения  $l$  принимает  $2l + 1$  различных значений, каждое из которых соответствует одному и тому же значению энергии. Кроме того, для данного значения  $n$  несколько состояний, соответствующих различным допустимым значениям  $l$  (которые будут все нечетными, если  $n$  четно, и четными, если  $n$  нечетно), имеют одну и ту же энергию. Если  $n$  нечетно, то существуют  $n/2 + 1/2$  таких различных значений  $l$ , если  $n$  четно, то их будет  $n/2$ . Следовательно, число состояний, имеющих энергию  $\hbar\omega(n + 1/2)$ , равно 1 при  $n = 1$ , 3 при  $n = 2$ , 6 при  $n = 3$ , 10 при  $n = 4$  и т. д., вообще кратность вырождения равна  $n(n + 1)/2$ .

**Кулоновский потенциал.** Другим потенциалом, для которого может быть найдено точное решение, является кулоновский потенциал  $V = -\eta^2/r$ . Как указано в (5.2.55) и в предыдущих уравнениях, уравнение для радиального множителя в случае этого потенциала имеет вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ -\kappa^2 + \frac{2M\eta^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \quad \kappa^2 = -\epsilon.$$

С другой стороны, уравнение для функции  $z^b e^{-z/2} F(-c | a + 1 | z) = f(z)$  имеет вид

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{a+1-2b}{z} \frac{df}{dz} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{2c+a+1}{2z} + \frac{b(b-a)}{z^2} \right] f = 0. \quad (12.3.38)$$

Мы можем перейти от одного уравнения к другому, положив  $z = 2\kappa r$ ,  $a = 2l + 1$ ,  $b = l + 1$  и  $\kappa = M\eta^2/[\hbar^2(c + l + 1)]$ . Следовательно, решение радиального уравнения, конечное при  $r = 0$ , имеет вид

$$R = N (2\kappa r)^{l+1} e^{-\kappa r} F\left(l+1 - \frac{M\eta^2}{\hbar^2 \kappa} \mid 2l+2 \mid 2\kappa r\right) \simeq \simeq N (2l+1)! \left\{ \frac{\exp\left[\kappa r - \frac{M\eta^2}{\hbar^2 \kappa} \ln(2\kappa r)\right]}{\Gamma\left(l+1 - \frac{M\eta^2}{\hbar^2 \kappa}\right)} - (-1)^l \frac{\exp\left[-\kappa r + \frac{M\eta^2}{\hbar^2 \kappa} \ln(2\kappa r) + i\pi\right]}{\Gamma\left(l+1 + \frac{M\eta^2}{\hbar^2 \kappa}\right)} \right\}, \quad r \rightarrow \infty.$$

Эта функция конечна при  $r \rightarrow \infty$  для всех положительных значений энергии частицы ( $x = ik$ ,  $k^2 = \varepsilon$ ), но для отрицательных значений энергии ( $x$  действительно) она конечна лишь в случае равенства нулю первого члена, т. е. в случае, когда  $M\eta^2/\hbar^2 x$  является целым числом, равным  $l+1$  или бóльшим. Другими словами, допустимые отрицательные значения энергии определяются равенствами

$$\varepsilon_n = -\left(\frac{M\eta^2}{\hbar^2 n}\right)^2, \quad E_n = -\frac{M\eta^4}{2n^2\hbar^2}, \quad n = l+1, \quad l+2, \dots \quad (12.3.39)$$

Эти значения являются, очевидно, связанными уровнями атома водорода, дающими бальмеровские серии для разностей энергий. Нормированная волновая функция, соответствующая квантовым числам  $n$ ,  $l$ ,  $m$ , в случае кулоновского потенциала равна

$$\begin{aligned} \psi_{mln}(r, \vartheta, \varphi) = & \sqrt{\left(\frac{2M\eta^2}{\hbar^2 n}\right)^3 \frac{2l+1}{8\pi n} \frac{(l-m)! (n-l-1)!}{(l+m)! [(n+l)!]^2}} \times \\ & \times e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta) \left(\frac{2M\eta^2}{\hbar^2 n} r\right)^l e^{-(M\eta^2/\hbar^2 n)r} L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2M\eta^2}{\hbar^2 n} r\right) \end{aligned} \quad (12.3.40)$$

или равна функции, комплексно сопряженной с данной.

Эта система является сильно вырожденной: все состояния для одного и того же значения  $n$  имеют одну и ту же энергию. Так как  $m$  может принимать здесь  $2l+1$  различных значений для каждого значения  $l$  и так как здесь допустимы все значения  $l$  от нуля до  $n-1$  для каждого значения  $n$ , то существуют  $n^2$  различных состояний, имеющих допустимую энергию  $E_n$ . Состояние при  $l=0$  называется *s-состоянием* (1s-состоянием при  $n=1$ , 2s-состоянием при  $n=2$  и т. д.), три состояния (для данного  $n$ ) при  $l=1$  называются *p-состояниями*, пять состояний при  $l=2$  называются *d-состояниями* и т. д.; последовательность, обычно употребляемая в атомных задачах, имеет вид *s, p, d, f, g, h, ...* с числом, стоящим впереди буквы и указывающим значение  $n$ . Как было сказано раньше, значение  $m$  указывает только ориентацию момента количества движения в пространстве и представляет интерес в случае, когда на электрон воздействует как электрическое поле ядра, так и однородное магнитное поле.

Если  $E$  положительна, волновая функция, конечная всюду, имеет для данных значений  $m$  и  $l$  вид

$$\begin{aligned} \phi(k, l, m | r, \vartheta, \varphi) = & \frac{e^{\pi M\eta^2/2\hbar^2 k}}{(2l+1)!} \left| \Gamma\left(l+1 + \frac{iM\eta^2}{\hbar^2 k}\right) \right| (2kr)^l e^{-ikr} \times \\ & \times e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta) F\left(l+1 + \frac{iM\eta^2}{\hbar^2 k} \mid 2l+2 \mid 2ikr\right) \simeq \\ \simeq & e^{im\varphi} P_l^m(\cos \vartheta) \frac{1}{kr} \sin \left[ kr + \frac{M\eta^2}{\hbar^2 k} \ln(2kr) - \frac{1}{2} \pi l - \Omega_{nl} \right], \quad kr \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (12.3.41)$$

где  $k^2 = \varepsilon = 2ME/\hbar^2$  и

$$\begin{aligned} \left| \Gamma\left(l+1 + \frac{iM\eta^2}{\hbar^2 k}\right) \right| &= \left| \Gamma\left(l+1 + \frac{iM\eta^2}{\hbar^2 k}\right) \right| e^{i\Omega_{nl}}, \\ \left| \Gamma\left(l+1 + \frac{iM\eta^2}{\hbar^2 k}\right) \right|^2 &= \left[ l^2 + \left(\frac{M\eta^2}{\hbar^2 k}\right)^2 \right] \left[ (l-1)^2 + \left(\frac{M\eta^2}{\hbar^2 k}\right)^2 \right] \dots \\ &\dots \left[ 1 + \left(\frac{M\eta^2}{\hbar^2 k}\right)^2 \right] \frac{\pi M\eta^2}{\hbar^2 k} / \text{sh} \left( \frac{\pi M\eta^2}{\hbar^2 k} \right). \end{aligned}$$

Из наличия логарифмического члена в аргументе синуса в асимптотическом выражении  $\phi$ , очевидно, вытекает, что кулоновский потенциал  $\eta^2/r$  продолжает оказывать влияние на частицу даже при очень больших значениях  $r$ . Даже на очень больших расстояниях длина волны не становится в точности равной  $2\pi/k$ .

Сила, обратно пропорциональная кубу расстояния<sup>1)</sup>. В классической динамике в случаях сил, обратно пропорциональных кубу или пятой степени расстояния ( $V = A/r^2$  или  $V = A/r^4$ ), также имеются решения, выражаемые в элементарных функциях. Это оказывается неверным в квантовой механике. Например, радиальное уравнение в случае силы притяжения, обратно пропорциональной кубу расстояния, имеет вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ \varepsilon + \frac{\gamma^2 - l(l+1)}{r^2} \right] R = 0,$$

где  $l(l+1)$  должно быть меньше силовой константы  $\gamma^2$  для того, чтобы частица, имеющая момент количества движения, соответствующий квантовому числу  $l$ , была связанной. Легко видеть, что случаи  $l > 0$  сводятся к случаю  $l = 0$ , если вместо  $\gamma^2$  взять  $\gamma^2 - l(l+1)$ ; поэтому мы ограничимся изучением только случая  $l = 0$ . Решением уравнения для возможного связанного состояния ( $\varepsilon = -\kappa^2$ )

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ -\kappa^2 + \frac{\gamma^2}{r^2} \right] R = 0,$$

конечным при  $r \rightarrow \infty$ , является сферическая функция Ганкеля мнимого аргумента комплексного порядка

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} R = h_{ip-\frac{1}{2}}(\kappa r) &= \sqrt{\frac{\pi}{2i\kappa r}} \left[ \frac{e^{\pi p}}{\operatorname{sh}(\pi p)} J_{ip}(\kappa r) - \frac{1}{\operatorname{sh}(\pi p)} J_{-ip}(\kappa r) \right] \simeq \\ &\simeq \begin{cases} \frac{1}{i\kappa r} e^{-\kappa r - \frac{1}{2}i\pi(ip+\frac{1}{2})}, & \kappa r \rightarrow \infty, \\ \sqrt{\frac{2i\pi}{\kappa r}} \frac{e^{\frac{1}{2}\pi p}}{|\Gamma(1+ip)| \operatorname{sh}(\pi p)} \sin \left[ p \ln \left( \frac{1}{2} \kappa r \right) - \Phi_p \right], & \kappa r \rightarrow 0, \end{cases} \end{aligned}$$

где  $p = \sqrt{\gamma^2 - \frac{1}{4}}$  и  $\Gamma(1+ip) = |\Gamma(1+ip)| e^{i\Phi_p}$ . Заметим, что при  $r \rightarrow 0$ , если  $p$  действительно ( $\gamma > 1/2$ ), эта функция не стремится ни к нулю, ни к бесконечности, но колеблется с постоянно возрастающей частотой как синус логарифма  $r$ .

Если интенсивность потенциала невелика ( $\gamma < 1/2$ ), хотя вызываемые им силы и являются силами притяжения ( $\gamma$  действительно), то  $p$  — мнимое число и порядок функций Бесселя действителен. Если это имеет место, то ни для какой отрицательной энергии нельзя найти волновую функцию, которая была бы конечной одновременно и при  $r = 0$  и при  $r = \infty$ . Приведенная выше функция Ганкеля (при действительном  $ip$ ) стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$ , но становится бесконечной при  $r = 0$ ; функция Бесселя  $J_{ip}(\kappa r)$  стремится к нулю при  $r \rightarrow 0$  и к бесконечности при  $r \rightarrow \infty$ . Таким образом, для незначительных сил притяжения, обратно пропорциональных кубу расстояния, не существует связанных уровней, хотя и существуют конечные волновые функции для положительных энергий. Функция Ганкеля, хотя и стремится к бесконечности, но интегрируема вместе со своим квадратом в окрестности  $r = 0$ ; если поэтому граничные условия требуют интегрируемости, а не конечности, то допустимы все отрицательные энергии.

При  $\gamma > 1/2$  порядок функций Бесселя,  $ip$ , будет мнимым и выписанная функция будет конечной для всех значений  $r$ , какое бы отрицательное значение для энергии мы ни выбрали. Этот результат кажется совершенно неожиданным. Возможно, что особенность силового поля достаточно велика для того, чтобы разрушить дискретность связанных состояний. Другая точка зрения сводится к тому, что условиями для стационарных

<sup>1)</sup> См. также § 35 цитированной на стр. 606 книги Л. Ландау и Е. Лифшица. — Прим. ред.

состояний не обязательно должны быть конечность (или интегрируемость). Исследуем интеграл от произведения двух функций, приведенных выше и соответствующих двум различным значениям  $x$ . Для этого умножим уравнение для одной из них на другую; вычтя из полученного обратную комбинацию и интегрируя по  $r$ , получим [как в (6.3.16) и последующих равенствах]

$$\begin{aligned} (x_1^2 - x_2^2) \int_0^\infty R_1 R_2 dr &= \left[ R_2 \frac{dR_1}{dr} - R_1 \frac{dR_2}{dr} \right]_0^\infty = \\ &= \frac{2i\pi p}{\sqrt{x_1 x_2}} \frac{e^{\pi p}}{|\Gamma(1+ip)|^2 \operatorname{sh}^2(\pi p)} \sin \left[ p \ln \left( \frac{x_2}{x_1} \right) \right]. \end{aligned}$$

Следовательно, две функции ортогональны только тогда, когда  $p \ln(x_2/x_1)$  является целочисленным кратным (положительным или отрицательным) числа  $\pi$ .

Таким образом, выполнение требования, чтобы волновые функции для связанных состояний при  $\gamma > 1/2$  образовывали ортогональную систему, вызывает квантование энергии. Но это не обычное квантование, так как оно определяет не сами уровни, а только связь одних уровней с другими. Если энергия  $E_0 = -x_0^2$  является допустимой, то волновые функции для бесконечной совокупности энергий  $E_n = -x_n^2$  связанных состояний будут все взаимно ортогональны:

$$E_n = -x_0^2 e^{2\pi n/p}, \quad n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$$

Если эти состояния соответствуют «допустимым» связанным уровням, то они простираются до  $-\infty$  и имеют точку накопления при нулевой энергии.

Для положительных энергий ( $x$  мнимое) все решения конечны при  $\gamma > 1/2$ , так что на фазовый угол для радиального решения при  $r \rightarrow \infty$  не налагается никаких ограничений и, следовательно, рассеяние может иметь место *только в том случае*, если мы потребуем, чтобы решения были взаимно ортогональны, что определяет их фазу при  $r=0$  и соответственно при  $r \rightarrow \infty$ .

Центральные поля с «концентрацией», большей чем  $1/r^2$  вблизи начала, также могут быть формально изучены, но трудности, встретившиеся нам в случае сил, обратно пропорциональных кубу расстояния, и нами уже рассмотренные, здесь возникают в значительно больших размерах. Радиальное уравнение имеет иррегулярную особую точку как при  $r=0$ , так и при  $r \rightarrow \infty$ , так что асимптотические ряды должны применяться в обоих концах промежутка изменения  $r$ . Как и в случае  $1/r^2$ , оба решения при малых  $r$  интегрируемы, но колеблются со все возрастающей частотой при  $r \rightarrow 0$ . Решения для больших значений  $r$  имеют асимптотические выражения  $e^{-xr}$  и  $e^{+xr}$ , так что одно из них конечно (или интегрируемо) на всем промежутке изменения  $r$  для всех значений  $x$ . Квантование связанных состояний происходит только тогда, когда применяется фазовое условие для ортогональности, рассмотренное выше.

Однако такие потенциальные поля, если и встречаются в физике, представляют очень малый интерес. Мы переходим теперь к другим, более полезным вопросам.

**Кулоновское поле в параболических координатах.** Обе разрешимые задачи с центральными силами приводят к вырожденным связанным уровням, когда несколько состояний имеют одну и ту же допустимую энергию. Соответствующее свойство решения заключается в том, что в уравнении Шредингера переменные разделяются в нескольких различных системах координат. В уравнении, соответствующем потенциалу гармонического осциллятора  $V = M\omega^2 r^2/2 = M\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)/2$ , переменные могут быть

разделены в прямоугольных координатах  $x, y, z$  и в круговых цилиндрических координатах  $\rho, \theta, z$ , а также и в сферических координатах  $r, \vartheta, \varphi$ . В уравнении, соответствующем кулоновскому потенциалу  $V = -\eta^2/r$ , переменные могут быть разделены в параболических и в вытянутых сфероидальных координатах, так же как и в сферических координатах. Решения в этих различных координатах соответствуют одной и той же совокупности допустимых энергий; действительно, новые решения должны быть линейными комбинациями сферических решений для вырожденных состояний, соответствующих данному уровню.

Чтобы иллюстрировать эти положения, рассмотрим задачу с кулоновским потенциалом в параболических координатах (см. стр. 277), определенных равенствами

$$x = \sqrt{\lambda\mu} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\lambda\mu} \sin \varphi, \quad z = \frac{\lambda - \mu}{2}, \quad r = \frac{\lambda + \mu}{2},$$

$$h_\lambda = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu}{\lambda} + 1}, \quad h_\mu = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\lambda}{\mu} + 1}, \quad h_\varphi = \sqrt{\lambda\mu}, \quad \lambda, \mu \geq 0.$$

В этих координатах переменные в уравнении Шредингера (при постоянной энергии  $E$ ) разделяются следующим образом:

$$\psi = L(\lambda) M(\mu) C(\varphi), \quad C'' + m^2 C = 0,$$

$$L'' + \frac{1}{\lambda} L' + \left( -\frac{1}{4} x^2 + \frac{x\sigma}{\lambda} - \frac{m^2}{4\lambda^2} \right) L = 0,$$

$$M'' + \frac{1}{\mu} M' + \left( -\frac{1}{4} x^2 + \frac{x\tau}{\mu} - \frac{m^2}{4\mu^2} \right) M = 0,$$

где

$$x^2 = -\epsilon = -2ME/\hbar^2 \quad \text{и} \quad \sigma + \tau = M\eta^2/\hbar^2 x$$

являются константами разделения. Сравнение с уравнением (12.3.38) показывает, что решение, конечное при  $\lambda = 0$ , имеет вид

$$L = (\lambda\lambda)^{m/2} e^{-x\lambda/2} F\left(\frac{1}{2}m + \frac{1}{2} - \sigma \mid m + 1 \mid x\lambda\right).$$

Подобное же выражение, но с заменой  $\lambda$  на  $\mu$  и  $\sigma$  на  $\tau$ , получаем для множителя  $M$ . Множитель  $C$  является, очевидно, тригонометрической функцией или мнимой экспонентой;  $m$  должно быть целым числом, для того чтобы  $C$  была периодической функцией  $\varphi$ .

Как и раньше, при действительном  $x$  (отрицательном  $E$ )  $\psi$  будет конечной в бесконечности только тогда, когда  $(m/2) + (1/2) - \sigma$  и  $(m/2) + (1/2) - \tau$  равны нулю или отрицательным целым числам, т. е.

$$\sigma = \frac{1}{2}m + \frac{1}{2} + s, \quad \tau = \frac{1}{2}m + \frac{1}{2} + t, \quad s, t = 0, 1, 2, \dots,$$

$$\sigma + \tau = n = s + t + m + 1 = 1, 2, 3, \dots = M\eta^2/\hbar^2 x,$$

что совпадает с (12.3.39) для допустимых значений энергии связанных состояний (как это и должно быть). Выразив вырожденные гипергеометрические функции через соответствующие связанным состояниям полиномы Лагерра  $L_s^m(x\lambda)$  и  $L_t^m(x\mu)$ , мы будем в состоянии подсчитать нормирующий множитель. Для этого придется интегрировать произведение  $|\psi|^2$  на элемент объема  $(1/4)(\lambda + \mu) d\lambda d\mu d\varphi$ ; для достижения окончательного результата потребуются несколько больше вычислений, чем прежде. Окончательно для связанного состояния  $n, s, t$  получим нормированную волновую функцию

$$\psi_{msn}(\lambda, \mu, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi} \left(\frac{M\eta^2}{\hbar^2 n}\right)^3 \frac{s!(n-s-m-1)!}{n[(s+m)!(n-s-1)!]^2}} e^{im\varphi} \times$$

$$\times \left[\frac{M\eta^2}{\hbar^2 n} \sqrt{\lambda\mu}\right]^m e^{-(M\eta^2/2\hbar^2 n)(\lambda+\mu)} L_s^m\left(\frac{M\eta^2\lambda}{\hbar^2 n}\right) L_t^m\left(\frac{M\eta^2\mu}{\hbar^2 n}\right). \quad (12.3.42)$$

Сравнивая эту систему волновых функций с системой функций для того же потенциала в сферических координатах, данных равенствами (12.3.40), мы видим, что

$$\begin{aligned}\psi_{001}(r, \vartheta, \varphi) &= \psi_{001}(\lambda, \mu, \varphi), \\ \psi_{002}(r, \vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{2}} [\psi_{032}(\lambda, \mu, \varphi) + \psi_{012}(\lambda, \mu, \varphi)], \\ \psi_{012}(r, \vartheta, \varphi) &= \sqrt{\frac{1}{2}} [\psi_{002}(\lambda, \mu, \varphi) - \psi_{012}(\lambda, \mu, \varphi)], \\ \psi_{112}(r, \vartheta, \varphi) &= \psi_{102}(\lambda, \mu, \varphi) \text{ и т. д.}\end{aligned}$$

Вообще любая из сферических функций при данных  $m$  и  $n$  равна линейной комбинации параболических функций при тех же самых значениях  $m$  и  $n$ , но различных значениях  $s$ . Конечно, и каждая параболическая функция может быть составлена из сферических функций для тех же самых  $m$  и  $n$ , но различных значений  $l$ .

**Формула Резерфорда.** Решения в параболических координатах могут быть также использованы для представления решений в случае положительных энергий, когда  $\kappa = ik$ ,  $k^2 = \varepsilon = (Mv/\hbar)^2$ , где  $M$  — масса частицы, а  $v$  — ее скорость при  $r \rightarrow \infty$ . Имеем

$$\psi = N e^{im\varphi} (\lambda\mu)^{m/2} e^{-ik(\lambda+\mu)/2} \times \\ \times F\left(\frac{m}{2} + \frac{1}{2} - \sigma \mid m+1 \mid ik\lambda\right) F\left(\frac{m}{2} + \frac{1}{2} - \tau \mid m+1 \mid ik\mu\right),$$

где  $\sigma + \tau = -iM\eta^2/\hbar^2 k$ . Величину  $\sigma$  можно выбрать так, чтобы полученное решение при  $m=0$  соответствовало плоской волне, распространяющейся слева вдоль оси  $z$ , «натыкающейся» на кулоновское поле, сосредоточенное вблизи начала, и частично рассеивающейся по всем направлениям от начала. Волна, распространяющаяся слева, должна в своем выражении содержать множитель  $e^{ikz} = e^{ik(\lambda-\mu)/2}$ , так что нужно потребовать, чтобы

$$F\left(\frac{m}{2} + \frac{1}{2} - \sigma \mid 1 \mid ik\lambda\right)$$

было равно  $e^{ikh\lambda}$ . Чтобы достигнуть этого, мы используем решение с  $m=0$  (решение, симметричное относительно оси  $z$ ). Нужно также положить  $\sigma = -1/2$ , так как  $F(1 \mid 1 \mid ik\lambda) = e^{ikh\lambda}$ . Тогда  $1/2 - \tau = iM\eta^2/\hbar^2 k = i\eta^2/\hbar v$  и решение в этом случае принимает вид

$$\begin{aligned}\psi &= \Gamma\left(1 - \frac{i\eta^2}{\hbar v}\right) e^{(\pi\eta^2/2\hbar v)} e^{\frac{1}{2}ik(\lambda-\mu)} F\left(\frac{i\eta^2}{\hbar v} \mid 1 \mid ik\mu\right) \simeq \\ &\simeq e^{ikz - i(\eta^2/\hbar v)\ln[k(r-z)]} + \left[ \frac{\eta^2 e^{i(\eta^2/\hbar v)\ln(1-\cos\vartheta) - 2i\vartheta}}{2Mv^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)} \right] e^{ikr + i(\eta^2/\hbar v)\ln(kr)}, \quad (12.3.43)\end{aligned}$$

где

$$k = Mv/\hbar, \quad \Gamma[1 + (i\eta^2/\hbar v)] = |\Gamma[1 + (i\eta^2/\hbar v)]| e^{i\vartheta}$$

и  $\vartheta = \arccos(z/r)$  — угол рассеяния. Эта асимптотическая форма пригодна при  $r-z \gg \hbar/Mv$ . Постоянная  $\eta^2$  — интенсивность кулоновского поля — положительна для поля притяжения и отрицательна в случае поля отталкивания. (В последнем случае нет связанных состояний, а встречаются только свободные состояния с положительной энергией.)

Мы видим, что достаточно далеко от положительной оси  $z$  (линии, идущей через центр поля в направлении падающего пучка) волновая функция распадается на две части: первый член определяет падающую волну, распространяющуюся (вообще говоря) в направлении оси  $z$ , хотя и с некоторым

искажением (логарифмический член в показателе), вызванным тем, что кулоновское поле «искривляет» плоскую волну даже на очень большом расстоянии; второй член соответствует радиально расходящейся «рассеянной» волне, амплитуда которой зависит от угла рассеяния  $\vartheta$  благодаря наличию фактора  $(\eta^2/2Mv^2r) \operatorname{cosec}^2(\vartheta/2)$ . Квадрат этой амплитуды дает *интенсивность* рассеяния для угла  $\vartheta$ ; эта величина соответствует *формуле Резерфорда* для рассеяния, классическому выражению для рассеяния в случае кулоновского поля. Рассеяние тем больше, чем меньше угол рассеяния  $\vartheta$ , чем меньше скорость  $v$  падающей частицы и чем больше потенциальный параметр  $\eta$ .

Если  $r = z$  (т. е. вдоль положительной оси  $z$ ), координата  $\mu$  равна нулю и

$$\psi \simeq \sqrt{\frac{(\pi\eta^2/\hbar v) e^{\pi\eta^2/\hbar v}}{\operatorname{sh}(\pi\eta^2/\hbar v)}} e^{ihz - i\delta}, \quad \vartheta \rightarrow 0, \quad z \rightarrow r.$$

Заметим, что в случае, когда кулоновская сила невелика, или когда скорость частицы велика ( $\pi\eta^2/\hbar v$  мало), амплитуда волны вблизи центра силы приближенно равна амплитуде падающей волны (единице). Для полей притяжения ( $\eta^2$  положительно), когда кулоновская сила велика или скорость частицы мала, амплитуда волны вблизи начала равна произведению  $\sqrt{2\pi\eta^2/\hbar v}$  на амплитуду падающей волны. С другой стороны, для полей отталкивания ( $\eta^2$  отрицательно), если  $-\pi\eta^2/\hbar v$  велико, амплитуда вблизи начала равна произведению малой величины  $e^{\pi\eta^2/\hbar v} \sqrt{-2\pi\eta^2/\hbar v}$  на амплитуду падающей волны. Иначе говоря, быстрые частицы находятся с одинаковой вероятностью как вблизи начала, так и где угодно в другом месте; медленные частицы стремятся сосредоточиться вблизи начала, если действуют силы притяжения, и, наоборот, стремятся избегать начала при силах отталкивания; результат вполне естественный.

**Другие разрешимые системы центральных сил.** Уравнение (12.3.33) для множителя волновой функции, зависящего от  $r$ , не разрешимо в известных функциях для случая потенциала, зависящего от степени  $r$ , за исключением случаев, когда показатель равен 2 [см. (12.3.37)] или  $-1$  [см. (12.3.40)]. Решение можно также получить при  $V = \beta r$ , но это не имеет особого интереса. Решение также может быть получено для силы отталкивания, обратно пропорциональной кубу расстояния ( $V = +\gamma^2/r^2$ ), но, как было указано на стр. 616, решение для силы притяжения, обратно пропорциональной кубу расстояния, не является удовлетворительным.

Центральные поля с потенциалом, пропорциональным более высокой положительной степени  $r$ , чем 2, имеют такие неправильности в особой точке в бесконечности, которые нельзя исследовать с помощью гипергеометрической функции; поля со степенями  $r$ , меньшими чем  $-2$ , содержат дополнительные неправильности в особой точке  $r = 0$ , которые не изучены полностью (такие поля к тому же не представляют большого практического интереса).

Точные решения в случае  $l = 0$  могут быть иногда получены и для потенциалов, имеющих более сложный вид, чем простые степени  $r$ . Достигнутые результаты были получены заменой независимого переменного  $r$  другим переменным  $z$ , являющимся функцией  $r$ ; при этом преобразованное уравнение для  $R$  может оказаться простым. Например, уравнение для  $R$  в случае экспоненциального потенциала притяжения  $V = -Be^{-r/d}$

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + [-z^2 + b^2 e^{-r/d}] R = 0, \quad z = -x^2, \quad b^2 = \frac{2MB}{\hbar^2},$$

преобразуется в уравнение Бесселя

$$\frac{d^2 R}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{dR}{dz} + \left(1 - \frac{4d^2 x^2}{z^2}\right) R = 0,$$

если положить  $z = 2bde^{-r/2d}$ . Следовательно, функция от  $r$ , стремящаяся к нулю при  $r \rightarrow \infty$  ( $z \rightarrow 0$ ), имеет вид  $J_{2dx}(2bde^{-r/2d})$ . Чтобы заставить ту же функцию стремиться к нулю при  $r \rightarrow 0$ , нужно подобрать  $x$ , а следовательно, и порядок функции  $J$  так, чтобы

$$J_{2dx}(2bd) = 0.$$

Наибольшее значение  $x$ , для которого это имеет место, даст наименьшую допустимую энергию  $-\kappa^2$ , так что оно может быть обозначено через  $\kappa_1(d, b)$  и т. д. Если  $2bd$  велико сравнительно с единицей, можно воспользоваться асимптотическим выражением для первого нуля функции Бесселя высокого порядка, приведенным на стр. 523. Тогда получаем

$$2bd \simeq 2d\kappa + 1,8558 (2d\kappa)^{1/3},$$

или

$$\kappa_1(d, b) \simeq b - 1,8558 \left(\frac{b}{4d^2}\right)^{1/3}, \quad (12.3.44)$$

или

$$E_1 \simeq -B + 3,7116 \left(\frac{\hbar^2 B^2}{8d^2 M}\right)^{1/3}, \quad 2bd \gg 1.$$

Наинизший уровень, когда потенциальная яма глубока, будет таким образом расположен выше дна ямы ( $E = -B$ ) на величину, которая изменяется обратно пропорционально «протяженности»  $d$  потенциальной ямы в степени две трети.

Это решение пригодно только для состояний с моментом количества движения, равным нулю ( $l = 0$ ); при  $l > 0$  входит «член центробежной силы»  $-l(l+1)/r^2$  и, так как он не может быть преобразован в простую степень переменного  $z$ , полученное уравнение не имеет решений, выражаемых через известные функции. Если  $d$  или  $b$  достаточно мало, то член  $-2/r^2$  может быть больше, чем  $b^2 e^{-r/d}$  для всех значений  $r$ ; в этом случае при  $l > 0$  для рассматриваемого потенциала нет связанных состояний.

Чтобы найти другие разрешимые при  $l = 0$  случаи, можно взять известные многочлены, являющиеся собственными функциями, и преобразовать их уравнения, стремясь получить члены, соответствующие членам уравнения (12.3.33): член, содержащий вторую производную, и член, содержащий  $R$ , множитель при котором является суммой постоянной величины (допустимая энергия), зависящей от квантового числа, и переменного слагаемого (потенциальная энергия), не зависящего от квантового числа. Если мы найдем такой случай, волновая функция будет нам уже известна.

Например, если  $R = Nz^{(a+1)/2} e^{-z/2} L_n^a(z)/\sqrt{z'}$ , где  $z = z(r)$  и  $z' = dz/dr$ , то уравнение для  $R$ , рассматриваемого как функция от  $r$ , имеет вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ -\frac{1}{4} (z')^2 + \left(n + \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{z'}{z}\right)^2 - \frac{a^2 - 1}{4} \left(\frac{z'}{z}\right)^2 - \frac{3}{4} \left(\frac{z''}{z'}\right)^2 + \frac{1}{2} \frac{z'''}{z'} \right] R = 0. \quad (12.3.45)$$

При  $z = br^\mu$  уравнение принимает вид

$$R'' + \left[ -\frac{1}{4} \mu^2 b^2 r^{2\mu-2} + \left(n + \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}\right) \mu^2 b r^{\mu-2} - \frac{a^2 \mu^2 - 1}{4r^2} \right] R = 0$$

и имеет постоянный член в скобках только при  $\mu = 1$  или  $\mu = 2$  [эти случаи уже были рассмотрены раньше, см. равенства (12.3.37) и (12.3.40)].



С другой стороны, при  $z = be^{-r/d}$  уравнение для  $R$ , выраженное через  $r$ ,

$$R'' + \left[ -\frac{b^2}{4d^2} e^{-2r/d} + \left( n + \frac{a}{2} + \frac{1}{2} \right) \frac{b}{d^2} e^{-r/d} - \frac{a^2}{4d^2} \right] R = 0$$

имеет в скобках постоянный член, который может быть отождествлен с энергией. На первый взгляд кажется, что один из членов, соответствующих потенциальной энергии, зависит от квантового числа  $n$ , но мы скоро увидим, что  $a$  можно подобрать так, чтобы  $(n + a/2 + 1/2)$  не зависело ни от  $n$ , ни от  $a$ .

Таким образом, уравнение (12.3.33) при потенциальной энергии

$$V = De^{2(r_0-r)/d} - 2De^{(r_0-r)/d}, \quad v = \frac{2MV}{\hbar^2},$$

будет соответствовать уравнению, написанному выше, если  $b$  положить равным

$$\frac{d}{\hbar} \sqrt{8MD} e^{r_0/d},$$

а  $a$  считать равным

$$\frac{d}{\hbar} \sqrt{8MD} - 2(n + 1/2).$$

Записанная потенциальная энергия имеет минимум, равный  $-D$ , при  $r = r_0$ , и такую вторую производную, что классическая частота (или скорее угловая скорость  $\omega = 2\pi\nu$ ) малых колебаний около этого минимума будет равна  $\omega = \sqrt{2D/d^2M}$ . Эта потенциальная энергия стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$ , а при достаточно больших  $D$  и  $r_0$  она становится очень большой и положительной при  $r = 0$ . Функция  $R$  подобрана так, что она принимает значение нуль при  $z = 0$  ( $r = +\infty$ ) и при  $z = \infty$  ( $r = -\infty$ ), в то время как радиальный множитель волновой функции должен стремиться к нулю при  $r \rightarrow 0$ ,  $z_0 = (d/\hbar) \sqrt{8MD} e^{r_0/d}$ . Во всяком случае, если  $z_0$  велико, функция  $R$  при  $z = z_0$  очень мала благодаря наличию показательного множителя  $e^{-z_0/2}$ , так что достаточно произвести незначительное изменение энергии  $\varepsilon$ , для того чтобы при  $z = z_0$   $R$  стало равным нулю; последнее важнее, чем обращение в нуль при  $z = \infty$ ; это малое изменение энергии вызовет незначительное изменение значений  $R$  при  $z \ll z_0$ , где  $R$  велико. Следовательно, если только  $e^{r_0/d}$  значительно больше единицы, допустимые энергии связанных состояний и волновые функции имеют приближенные выражения:

$$\begin{aligned} E_n &\approx -D + \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{2D}{M}} \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2}{2Md^2} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 = \\ &= -D + \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2\omega^2}{4D} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2, \\ \psi_n &\approx Nz^{\alpha-n} e^{-z/2+r/2d} L_n^{2\alpha-2n-1}(z), \end{aligned}$$

где  $\omega = \sqrt{2D/d^2M}$ ,  $z = 2ae^{(r_0-r)/d}$ ,  $\alpha = (d/\hbar) \sqrt{2MD}$ . Мы видим, что  $n$  может быть равно нулю или целому положительному числу, меньшему чем  $\alpha - \frac{1}{2}$ .

Для получения нормирующего множителя (интеграла от  $\psi_n^2$ ) в пределах нашего приближения ( $e^{r_0/d}$  велико) можно интегрировать от  $z = 0$  до  $z = \infty$ .

Еще одна потенциальная функция, для которой возможно точное решение при  $l = 0$ , имеет вид

$$V(r) = V_0 \operatorname{th}^2 \left( \frac{r}{a} \right),$$

что представляет собой симметричный случай потенциала, рассмотренного на стр. 602 и следующих. Решения для этого потенциала, обращающиеся в нуль при  $x = \pm \infty$ , были даны в (12.3.26). В данном случае, однако,

мы должны иметь  $\psi = 0$  при  $r = 0$ . Это налагает ограничения на допустимые состояния и требует, чтобы квантовое число было нечетным, так как в этом случае волновые функции антисимметричны относительно начала; поскольку потенциал симметричен, волновые функции через одну должны обращаться в нуль при  $r = 0$ . Следовательно, волновые функции и допустимые уровни энергии имеют вид

$$R_{00n}(r) = N (\operatorname{ch} z)^{-\gamma+2n+\frac{3}{2}} F \left( -2n-1, 2\gamma-2n-1 \mid \gamma-2n-\frac{1}{2} \mid \frac{e^{-z}}{e^z+e^{-z}} \right) = \\ = N' (\operatorname{ch} z)^{-\gamma+2n+\frac{3}{2}} T_{2n+1}^{\gamma-2n-\frac{3}{2}} (\operatorname{th} z),$$

$$\varepsilon_n = 2\gamma \left( 2n + \frac{3}{2} \right) - (2n+1)(2n+2) - \frac{1}{2}, \quad \gamma = \sqrt{v + \frac{1}{4}}, \quad z = \frac{r}{d},$$

$$E_n = \sqrt{\frac{2}{M} \frac{\hbar}{d}} \sqrt{V_0 + \frac{\hbar^2}{8Md^2} \left( 2n + \frac{3}{2} \right) - \frac{\hbar^2}{2Md^2} \left[ (2n+1)(2n+2) + \frac{1}{2} \right]};$$

здесь мы оставили только нечетные уровни из семейства (12.3.25) (взяв  $2n+1$  вместо  $n$ ), так как только нечетные собственные функции обращаются в нуль при  $r = 0$ . Для более общего потенциала в уравнении (12.3.22) также может быть найдено точное решение для радиальной координаты, если мы подберем нашу энергию так, чтобы решение, стремящееся к нулю при  $r \rightarrow \infty$ , обращалось также в нуль и при  $r = 0$  (вместо  $r \rightarrow -\infty$ ).

Это приблизительно указывает, как далеко мы можем идти в получении точных решений задач с центральными силами с помощью известных функций. Другие решения и допустимые энергии для других потенциальных полей могут быть получены приближенными методами, разобранными в гл. 9. Метод факторизации [см. уравнение (6.3.18) и таблицы в конце гл. 6] не позволяет найти другие случаи, хотя и может упростить вычисление  $R$ .

**Возмущения вырожденных систем.** Приемы вычисления энергий и собственных функций в случаях, когда потенциалы незначительно отличаются от тех, для которых известно точное решение, совпадают с приемами, данными в формуле (12.3.15) и следующих. Здесь, однако, появляется дополнительное осложнение, вызванное пространственной симметрией решений задачи с центральными силами. Как мы уже видели, эта симметрия влечет за собой вырождение, при котором несколько состояний имеют одну и ту же допустимую энергию. Следовательно, когда мы составляем возмущенную волновую функцию, считая ее равной невозмущенной функции  $\varphi_n$ , сложенной с поправочной суммой, содержащей функции  $\varphi_m$  при  $m$ , отличном от  $n$ , мы сталкиваемся с дополнительной проблемой: какую из нескольких функций  $\varphi$ , имеющих данную невозмущенную энергию, взять за  $\varphi_n$ ? Естественно в качестве невозмущенной волновой функции взять линейную комбинацию всех функций  $\varphi$  для рассматриваемой нами энергии, а потом предоставить возмущению подобрать подходящую комбинацию.

Чтобы показать, как это делается, рассмотрим случай уравнения Шредингера

$$\mathcal{H}\psi = \left[ V - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \right] \psi = E\psi.$$

Если теперь потенциальная энергия  $V$  может быть заменена суммой потенциала  $V_0$ , для которого существуют точные решения, и возмущающего потенциала  $V_1$ , малого по сравнению с  $V_0$ , то можно применить метод

итераций. Полагаем

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V_1,$$

где

$$\mathcal{H}_0 = \left[ V_0 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \right],$$

причем уравнение

$$\mathcal{H}_0 \chi_{mn} = E_n^0 \chi_{mn}$$

может быть точно решено относительно допустимых энергий  $E_n^0$  и собственных функций  $\chi_{mn}$  невозмущенной системы. В наших обозначениях мы приняли во внимание возможность вырождения, для чего применили два индекса у  $\chi$  и только один у  $E^0$ . Совокупность  $\chi_{mn}$  при различных возможных значениях  $m$  (одном или нескольких) соответствует одной и той же энергии  $E_n^0$ . Функция Грина для невозмущенной системы является решением уравнения

$$(E - \mathcal{H}_0) G = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

и имеет вид

$$G_E(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) = \sum_{m, n} \frac{\bar{\chi}_{mn}(\mathbf{r}_0) \chi_{mn}(\mathbf{r})}{E - E_n^0}, \quad m = 1, 2, \dots, M_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Интегральное уравнение, соответствующее уравнению  $(\mathcal{H}_0 + V_1)\psi = E\psi$ , имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{m, n} \frac{\chi_{mn}(\mathbf{r})}{E - E_n^0} \iint \bar{\chi}_{mn}(\mathbf{r}_0) V_1(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d\mathbf{v}_0. \quad (12.3.46)$$

До сих пор это рассуждение в основном совпадало с рассуждением на стр. 599. Однако теперь мы предположим, что  $\psi$  не обязательно стремится к какому-либо одному  $\chi_{mn}$  при стремлении  $V_1$  к нулю;  $\psi$  может стремиться к некоторой линейной комбинации всех  $\chi_{mn}$ , соответствующих определенной энергии  $E_n^0$ . Полагаем

$$\psi = \sum_r C_r \chi_{rn} + \sum_{s, p \neq n} A_{sp} \chi_{sp}.$$

Подставляя это в выражение (12.3.46), получаем сначала для коэффициентов  $C_m$  соотношения

$$(E - E_n^0) C_m = \sum_r C_r u_{mn, rn} + \sum_{s, p \neq n} A_{sp} u_{mn, sp},$$

где

$$u_{mn, sp} = \iint \bar{\chi}_{mn} V_1 \chi_{sp} d\mathbf{v}.$$

Здесь в соответствии с первым равенством (12.3.16) первая сумма должна свестись к одному члену. Другими словами, коэффициенты  $C_m$  линейной комбинации нужно выбрать так, чтобы

$$\sum_r C_r u_{mn, rn} = E_n^1 C_m.$$

Для того чтобы это могло иметь место, нужно, чтобы определитель, составленный из коэффициентов при  $C_m$ , был равен нулю:

$$\Delta_n = \begin{vmatrix} (u_{1n, 1n} - E_n^1) & u_{1n, 2n} & \dots & u_{1n, M_n n} \\ u_{2n, 1n} & (u_{2n, 2n} - E_n^1) & \dots & u_{2n, M_n n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{M_n n, 1n} & u_{M_n n, 2n} & \dots & (u_{M_n n, M_n n} - E_n^1) \end{vmatrix} = 0; \quad (12.3.47)$$

это дает уравнение степени  $M_n$  для  $E_n^1$  с коэффициентами, зависящими от элементов матрицы  $u_{rn, mn}$ . Таким образом получаем  $M_n$  корней, которые можно упорядочить; обозначим их через  $E_{\sigma n}^1$  (некоторые из этих корней могут оказаться равными; возмущение, конечно, может и не снять все вырождение). Корню  $E_{\sigma n}^1$  соответствуют коэффициенты  $C_{\sigma m}$  (которые могут быть нормированы так, чтобы  $\sum_m |C_{\sigma m}|^2 = 1$ ) и линейные комбинации волновых функций

$$\varphi_{\sigma n} = \sum_m C_{\sigma m} \chi_{mn}, \quad \iiint |\varphi_{\sigma n}|^2 dv = 1.$$

Для каждого допустимого значения  $E_n^0$  существует  $M_n$  таких линейных комбинаций  $\varphi$ , являющихся решениями невозмущенного уравнения  $\mathcal{H}_0 \varphi_{\sigma n} = E_n^0 \varphi_{\sigma n}$  при одном и том же значении  $E_n^0$ . Эти комбинации ортогональны друг другу (см. стр. 65 тома I) и нормированы. Таким образом, они являются такими же подходящими волновыми функциями для невозмущенного волнового уравнения, как и функции  $\chi$ . На самом же деле, для рассматриваемой задачи они удобнее, чем функции  $\chi$ , так как, пользуясь ими, получаем при данном  $n$  для  $V_1$  диагональную матрицу (что следует из самого способа их построения)

$$\iiint \bar{\varphi}_{\sigma n} V_1 \varphi_{\tau n} dv = \delta_{\sigma\tau} E_{\sigma n}^1,$$

хотя матричные элементы для других значений  $n$

$$\iiint \bar{\varphi}_{\sigma p} V_1 \varphi_{\tau n} dv = u_{\sigma p, \tau n}, \quad p \neq n,$$

могут быть отличны от нуля даже при  $\sigma \neq \tau$ .

Если мы теперь начнем вычисление возмущений, отправляясь от собственных функций  $\varphi$ , «приспособленных» к возмущению  $V_1$ , то рассуждения будут протекать почти так же легко, как и в случае невырожденных состояний. Так как возмущение не «перемешивает» функции  $\varphi$ , мы должны иметь только одну из них для данного  $E_n$  в качестве основного члена в выражении

$$\psi = \varphi_{\sigma n} + \sum_{\tau, p \neq n} A_{\tau p} \varphi_{\tau p}.$$

Подставляя невозмущенную совокупность  $\varphi_{\sigma n}$  вместо  $\chi_{mn}$  в выражение (12.3.46), мы можем теперь получить систему уравнений, аналогичных (12.3.16); из этих уравнений можно найти последовательные приближения решения

$$\psi^{-1}(\mathbf{r}) = 0, \quad \psi^0(\mathbf{r}) = \varphi_{\sigma n}(\mathbf{r}),$$

$$\psi^{\nu}(\mathbf{r}) = \varphi_{\sigma n}(\mathbf{r}) + \sum_{\tau, m \neq n} \frac{\iiint \bar{\varphi}_{\tau m} V_1 \psi^{\nu-1} dv_0}{E_n^0 - E_m^0 + \iiint \bar{\varphi}_{\tau n} V_1 \psi^{\nu-2} dv_0}, \quad (12.3.48)$$

$$E^{\nu} = E_n^0 + \iiint \bar{\varphi}_{\sigma n}(\mathbf{r}_0) V_1(\mathbf{r}_0) \psi^{\nu-1}(\mathbf{r}_0) dv_0,$$

с помощью которых можно вычислить допустимые энергии и волновые функции для возмущенного состояния способом, совершенно аналогичным содержащемуся в равенствах (12.3.17) и (12.3.18). Функции  $\psi^{\nu}$  и энергии  $E^{\nu}$  приближаются к истинным решениям при  $\nu \rightarrow \infty$  в пределах радиуса сходимости, найденного в § 9.1.

Резюмируем: чтобы подсчитать влияние возмущения  $V_1$  на вырожденную систему, мы сначала находим ту определенную систему собственных

функций  $\varphi_{nl}$ , для которой матрица, соответствующая  $V_1$ , является диагональной для всех состояний, имеющих одну и ту же невозмущенную энергию  $E_n^0$ . С помощью этой «заранее подобранной» системы функций вычисление влияния возмущения  $V_1$  на систему может быть выполнено так же, как если бы система была невырожденной.

**Эффект Штарка.** В качестве примера вычислений такого рода считаем влияние однородного поля (например, однородного электрического поля, если частица заряжена) на различные системы с центральными силами. Возмущающий потенциал имеет вид

$$Fz = Fr \cos \vartheta = \frac{1}{2} F (\lambda - \mu).$$

Если волновая функция распадается на множители в сферических координатах (волновые функции являются собственными функциями для компоненты  $z$  и для квадрата момента количества движения, так же как и для энергии), то множители, зависящие от углов, являются сферическими гармониками, как указано в равенстве (12.3.32). И для гармонического осциллятора и для случая кулоновского потенциала энергия не зависит ни от  $l$ , ни от  $m$ , так что эти состояния будут вырожденными. Чтобы выяснить, будут ли сферические состояния, характеризуемые квантовыми числами  $l$  и  $m$ , подходящими для возмущения, вызванного однородным полем, нужно только посмотреть, будет ли матрица, составленная для  $Fz$ , диагональной по квантовым числам  $m$  и  $l$ . Но эти квантовые числа «включают» интегрирование множителей  $X_{ml}$ , зависящих от углов, так что мы можем провести это исследование прежде, чем решим вопрос о том, какая радиальная функция должна рассматриваться в качестве невозмущенного состояния.

Так как возмущающий потенциал  $V_1 = Fr \cos \vartheta$  не зависит от угла  $\varphi$ , мы можем быть уверены, что матрица с элементами  $U$  будет диагональной относительно квантового числа  $m$ . Другими словами,

$$\begin{aligned} U_{mln, m'l'n'} &= NN' \int_0^{2\pi} e^{im\varphi - im'\varphi} d\varphi \int_0^\pi \cos \vartheta P_l^m P_{l'}^{m'} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^\infty r R_{ln} R_{l'n'} r^2 dr = \\ &= 2\pi \delta_{mm'} NN' \int_0^\pi \cos \vartheta P_l^m P_{l'}^{m'} \sin \vartheta d\vartheta \int_0^\infty r R_{ln} R_{l'n'} r^2 dr. \end{aligned}$$

Прежде всего отметим, что выражение для  $V_1$  содержало бы  $\varphi$ , если бы полярная ось в сферических координатах не была направлена вдоль возмущающей силы; поэтому  $U$  не была бы диагональной по  $m$ . Благодаря нашему выбору ориентации мы диагонализировали часть матрицы.

Однако матрица не будет диагональной по квантовому числу  $l$ , так как интеграл по  $\vartheta$  равен нулю при  $m = m'$ ,  $l = l'$  (дополнительный множитель  $\cos \vartheta$  делает подинтегральную функцию антисимметричной относительно  $\vartheta = \pi/2$ ). Так как

$$\cos \vartheta P_l^m (\cos \vartheta) = \frac{l-m+1}{2l+1} P_{l+1}^m (\cos \vartheta) + \frac{l+m}{2l+1} P_{l-1}^m (\cos \vartheta),$$

то отличными от нуля будут только те элементы  $U$ , для которых  $l' = l \pm 1$ . Бесплезно идти дальше в этом направлении; мы уточнили ориентацию системы сферических координат требованием, чтобы матрица  $\tilde{U}$  была диагональной по  $m$ ; чтобы сделать ее диагональной по  $l$ , нужно выбрать волновые функции и квантовые числа в соответствии с другой системой координат.

Для изучения возмущения однородным полем трехмерного гармонического осциллятора удобна система прямоугольных координат  $x, y, z$ . Волновая функция, распавшаяся на три множителя вида, указанного в (12.3.7),

$$\varphi_{k_s n}(x, y, z) = \frac{(\beta/\pi)^{3/4}}{\sqrt{2^n k! s! (n-s-k-1)!}} e^{-\frac{1}{2}\beta r^2} \times \\ \times H_k(x\sqrt{\beta}) H_s(y\sqrt{\beta}) H_{n-k-s-1}(z\sqrt{\beta}),$$

дает решение уравнения Шредингера для центральной силы с потенциалом  $V_0 = \frac{1}{2}M\omega^2 r^2 = \frac{1}{2}M\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$  и является линейной комбинацией решений, данных в равенстве (12.3.37), для различных  $m$  и  $l$ , но при одном и том же  $n$ . Энергия для всех этих вырожденных состояний равна, конечно,  $\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Тем не менее приведенные выше решения  $\varphi$  более удобны для возмущения однородной силой, так как матричные элементы  $Fz$  диагональны относительно обоих индексов  $k$  и  $s$  в силу ортогональности полиномов  $H_k$  и  $H_s$ . В действительности, как мы знаем из равенства (12.3.9), возмущенная волновая функция имеет вид  $\varphi_{k_s n}(x, y, z + b)$ , где  $b = F/M\omega^2$  (множители, зависящие от  $x$  и  $y$ , вовсе не подвергаются возмущению) и возмущенные уровни энергии даются равенством

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{F^2}{2M\omega^2}.$$

Волновые функции кулоновского поля не могут быть разделены на множители в прямоугольных координатах, но в параболических координатах они соответствуют функциям, определенным равенствами (12.3.42). Возмущение  $\frac{1}{2}F(\lambda - \mu)$  не зависит от  $\varphi$  (если мы выберем параболическую ось параллельно возмущающей силе), так что  $U$  диагональна относительно  $m$ . Остаток интеграла содержит

$$\int_0^\infty \int (\lambda\mu)^m e^{-\gamma(\lambda+\mu)} L_s^m(\gamma\lambda) L_{s'}^m(\gamma\lambda) L_{n-s-m-1}^m(\gamma\mu) L_{n-s'-m-1}^m(\gamma\mu) (\lambda^2 - \mu^2) d\lambda d\mu,$$

что равно нулю, если  $s'$  не равно  $s$  (хотя, если мы выпишем интеграл для  $n'$  и  $n$ , то увидим, что не все члены  $U_{n's'm', nsm}$  вне диагонали равны нулю; если  $n' \neq n$ , то члены, для которых  $n' + s' \neq n + s$ , не обращаются в нуль). Следовательно, параболические волновые функции могут быть использованы для этого возмущения. Для параболического состояния с квантовыми числами  $n, s$  и  $m$  в случае системы, имеющей потенциальную энергию  $(-\eta^2/r) + Fz$ , поправка первого порядка для подсчета энергии имеет вид (см. стр. 728 тома I)

$$E \simeq -\frac{M\eta^4}{2n^2\hbar^2} - \frac{3}{2}F \frac{\hbar^2}{M\eta^2} n(n-2s-m-1). \quad (12.3.49)$$

Нужно заметить, что если однородное поле простирается до бесконечности, то существует некоторое большое по абсолютной величине отрицательное значение  $z$ , для которого потенциальная энергия равна  $E$ ; при больших значениях абсолютной величины  $z$  частица может свободно двигаться к  $-\infty$ . Как мы видели на стр. 611, в волновой механике частица может в конце концов преодолеть потенциальный барьер, хотя при высоком или широком барьере для этого потребуется очень много времени; однородное поле вызывает появление барьера, через который частица может просачиваться из области, близкой к началу координат, в область, близкую к  $z = -\infty$ . Здесь, строго говоря, допустимы все со-

стояния с отрицательной энергией и квантованные состояния вблизи начала не являются истинно стационарными, так как частица может в конце концов оказаться вне влияния силового центра. Тем не менее если  $F$  сравнительно мало, потенциальный барьер будет очень широким; требуется чрезвычайно много времени для того, чтобы частица могла просочиться; состояния с энергиями, приведенными в равенстве (12.3.49), будут в сущности стационарными состояниями.

**Собственные функции в импульсном представлении.** Иногда, например при изучении рассеяния атомами рентгеновских лучей, более существенно подсчитать плотность вероятности в пространстве импульсов, чем в пространстве конфигураций. Как показано в § 2.6, волновая функция в импульсном представлении является решением соответствующего уравнения Шредингера, получающегося из уравнения для обычных собственных функций заменой  $x$  через  $i\hbar (\partial/\partial p_x)$  и  $-i\hbar (\partial/\partial x)$  через  $p_x$ . Но прежде чем решать новое уравнение, мы можем воспользоваться тем фактом, что эти две волновые функции являются преобразованиями Фурье одна для другой. Волновая функция в импульсном представлении  $\chi$ , квадрат которой дает плотность вероятности для импульсов, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{1}{2M} |p|^2 \chi + V(i\hbar \text{grad}_p) \chi = E\chi \quad (12.3.50)$$

где  $i\hbar \text{grad}_p$  должно быть подставлено вместо  $\mathbf{r}$  в потенциальную функцию  $V$ ) связана с собственной функцией в координатном представлении  $\psi$ , удовлетворяющей обычному уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi + V(r) \psi = E\psi,$$

соотношениями ( $N$  — число измерений)

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{p}) &= \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^N \iiint e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{v}_r, \\ \psi(\mathbf{r}) &= \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right]^N \iiint e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \chi(\mathbf{p}) d\mathbf{v}_p. \end{aligned} \quad (12.3.51)$$

Эта интегральная связь имеет место также для более общих, зависящих от времени волновых функций  $\Psi$  и  $\Xi$ , но члены  $E\psi$  и  $E\chi$  в соответствующих уравнениях должны быть заменены через  $i\hbar (\partial\Psi/\partial t)$  и  $i\hbar (\partial\Xi/\partial t)$ .

Простым примером является одномерный гармонический осциллятор. Волновое уравнение для  $\chi$  дано в (12.3.19) и решения, являющиеся собственными функциями, как видно из равенств (12.3.20), имеют вид

$$\chi_n(p) = \frac{i^{-n}}{\sqrt{2^n n! \hbar \sqrt{\pi\beta}}} e^{-\frac{1}{2}(p^2/\hbar^2\beta)} H_n\left(\frac{p}{\hbar \sqrt{\beta}}\right),$$

что следует сравнить с выражением (12.3.7). Чтобы показать, что это решение удовлетворяет соотношениям (12.3.51), мы воспользуемся производящей функцией для полиномов Эрмита, приведенной в таблице в конце гл. 6:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta\hbar}} \sum_{n=0}^{\infty} t^n \sqrt{\frac{2^n}{n!}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\varrho z} \varphi_n(z) dz &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar \sqrt{\pi\beta}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2 + 2tz - \frac{1}{2}z^2 - i\varrho z} dz = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\hbar \sqrt{\pi\beta}}} e^{i^2 - 2it\varrho - \frac{1}{2}\varrho^2} = \sum_{n=0}^{\infty} t^n \sqrt{\frac{2^n}{n!}} \chi_n(p), \end{aligned} \quad (12.3.52)$$

где  $z = x \sqrt{\beta}$  и  $\rho = p/\hbar \sqrt{\beta}$ . Приравнявая коэффициенты при  $l^n$ , мы видим что  $\varphi_n$  и  $\chi_n$  удовлетворяют соотношениям (12.3.51) и (12.3.24).

Мы, конечно, можем построить волновую функцию для трехмерного гармонического осциллятора с потенциальной функцией  $\frac{1}{2}M\omega^2 r^2$ . Подставив  $p/\hbar \sqrt{\beta}$  в выражение (12.3.37) и сделав необходимые изменения  $\phi$  в нормирующем множителе, получим

$$\chi_{mln}(p, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{8\pi\hbar^3\beta^3} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{\left(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}l - \frac{1}{2}\right)!}{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}n + \frac{1}{2}l + 1\right)\right]^3}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta) \times \\ \times (p^2/\beta\hbar^2)^{\frac{1}{2}l} e^{-\frac{1}{2}p^2/\beta\hbar^2} L_{\frac{1}{2}n - \frac{1}{2}l - \frac{1}{2}}^{l + \frac{1}{2}}(p^2/\beta\hbar^2), \quad (12.3.53)$$

что является (за исключением степени  $i$ , которая может быть опущена) преобразованием Фурье функции  $\psi_{mln}$ , определенной равенством (12.3.37). Если  $n$  — целое положительное число, если  $(n-l)$  — целое положительное нечетное число и если  $m$  равно нулю или целому числу, не превышающему  $l$ , то  $\chi$  или комплексно сопряженная с ней функция определяет стационарное состояние, соответствующее допустимой энергии  $\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Таким образом, мы разбили на множители нашу волновую функцию в сферических импульсных координатах  $p$  (модуль  $p$ ),  $\theta$  (угол между  $p$  и осью  $z$ ) и  $\phi$  (угол между плоскостью  $z, p$  и плоскостью  $x, z$ ).

Вычисление интеграла (12.3.51) в случае кулоновского потенциала притяжения  $-(\eta^2/r)$  для собственной функции в импульсном представлении, соответствующей координатной функции, приведенной в равенстве (12.3.40), не очень просто. Показатель экспоненты, стоящей под знаком интеграла Фурье,  $i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar$ , в сферических пространственных и импульсных координатах принимает вид

$$i \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar} = i \frac{pr}{\hbar} [\sin \vartheta \sin \theta \cos(\varphi - \phi) + \cos \vartheta \cos \theta].$$

Часть интеграла, соответствующая координате  $\varphi$ , может быть вычислена с помощью интегрального представления функций Бесселя. Имеем

$$\int_0^{2\pi} e^{-i(pr/\hbar) \sin \theta \sin \vartheta \cos(\varphi - \phi) + im\varphi} d\varphi = 2\pi i^m e^{im\phi} J_m\left(\frac{pr}{\hbar} \sin \vartheta \sin \theta\right).$$

Следующий интеграл по переменному  $\vartheta$  также может быть выражен через функции Бесселя

$$\int_0^\pi e^{-i(pr/\hbar) \cos \vartheta \cos \theta} J_m\left(\frac{pr}{\hbar} \sin \vartheta \sin \theta\right) P_l^m(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \\ = -(-i)^{l+m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{pr}} P_l^m(\cos \theta) J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{pr}{\hbar}\right).$$

Интеграл в первом из равенств (12.3.51) принимает вид

$$\chi = -(-i)^l \sqrt{\frac{\hbar^2 n^2}{8M^2 \eta^4} \frac{2l+1}{4\pi n p} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \times \\ \times \int_0^\infty u^{l+\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{2}u} J_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}u\omega\right) L_{n-l-1}^{2l+1}(u) du,$$



где  $u = 2M\gamma^2 r / \hbar^2 n$  и  $\omega = \hbar n p / M\gamma^2$ . Пользуясь интегральным соотношением между полиномами Лагерра и Гегенбауэра, приведенным в таблице в конце гл. 6, мы имеем окончательно (пренебрегая множителями типа  $i^l$ ),

$$\chi_{nlm}(p, \theta, \phi) = \sqrt{\left(\frac{2\hbar n}{M\gamma^2}\right)^3 \frac{2l+1}{2\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{n(n-l-1)!}{(n+l)!}} \times \\ \times e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \left(\frac{1-z}{2}\right)^2 (1-z^2)^{\frac{1}{2}l} T_{n-l-1}^{l+\frac{1}{2}}(z), \quad (12.3.54)$$

где  $z = [(\hbar n p / M\gamma^2)^2 - 1] / [(\hbar n p / M\gamma^2)^2 + 1]$ . Переменное  $z$  изменяется от  $-1$  до  $+1$ , когда  $p$  меняется от нуля до бесконечности. Допустимые энергии для связанных состояний совпадают с приведенными в (12.3.39)<sup>1)</sup>.

Волновые функции в импульсном представлении для некоторых низших состояний имеют вид

$$\chi_{100} = \sqrt{\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2\hbar}{M\gamma^2}\right)^3 \left[\left(\frac{\hbar p}{M\gamma^2}\right)^2 + 1\right]^{-2}}, \\ \chi_{210} = \sqrt{\frac{8}{\pi^2} \left(\frac{4\hbar}{M\gamma^2}\right)^3 \left(\frac{2\hbar p}{M\gamma^2}\right) \left[\left(\frac{2\hbar p}{M\gamma^2}\right)^2 + 1\right]^{-3}} \cos \theta, \\ \chi_{200} = \sqrt{\frac{2}{\pi^2} \left(\frac{4\hbar}{M\gamma^2}\right)^3 \left[\left(\frac{2\hbar p}{M\gamma^2}\right)^2 - 1\right] \left[\left(\frac{2\hbar p}{M\gamma^2}\right)^2 + 1\right]^{-3}};$$

эти функции убывают при больших значениях  $p$ . Вторая из них имеет узел в плоскости  $x, y$ , а третья имеет сферический узел при  $p = M\gamma^2 / 2\hbar$ .

С помощью этих волновых функций можно найти средний квадрат импульса частицы, когда система находится в состоянии, характеризуемом квантовыми числами  $n, l, m$ . Этот средний квадрат равен

$$\iint \int [\chi_{nlm}]^2 p^2 dv_p = \left(\frac{M\gamma^2}{\hbar n}\right)^2;$$

он будет наибольшим для наименьшего связанного состояния ( $n = 1$ ), убывает при возрастании  $n$  и не зависит от квантовых чисел  $l$  и  $m$ .

Момент количества движения частицы может быть подсчитан методом, аналогичным методу, примененному для получения уравнений (12.3.34):

$$\mathcal{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\hbar \mathbf{p} \times \text{grad}_p = -i\hbar \left[ \mathbf{a}_z \frac{\partial}{\partial \phi} - \mathbf{a}_x \left( \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \phi \text{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) + \right. \\ \left. + \mathbf{a}_y \left( \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \text{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \right].$$

Как и раньше, мы находим, что  $\chi_{mln}$  является собственной функцией для  $\mathcal{M}_z$  с собственным значением  $m\hbar$  (или  $-m\hbar$  для комплексно сопряженной функции), а также и собственной функцией для  $|\mathcal{M}|^2$  с собственным значением  $\hbar^2 l(l+1)$ .

**Рассеяние в центральном поле.** В теории несвязанных состояний с положительной энергией представляет интерес изучение частицы, движущейся по некоторому направлению, наталкивающейся на центральное поле и рассеиваемой им. На очень больших расстояниях волновая функция падающей частицы представляет собой плоскую волну (распространяющуюся в положительном направлении оси  $z$ , например, вида  $e^{ipz/\hbar}$ ), соответствующую известному начальному импульсу  $p$  в направлении оси  $z$ . Рас-

<sup>1)</sup> Чрезвычайно изящный метод нахождения волновых функций в импульсном представлении для атома водорода был дан В. Фокком [Fock V., Z. f. Phys., 98, 145 (1935)]. — Прим. ред.

сеянная волна на большом расстоянии является радиально расходящейся волной  $e^{i\sqrt{r}}/\sqrt{r}$  с амплитудой, зависящей от угла рассеяния  $\vartheta$ . Если падающая плоская волна имеет единичную амплитуду и представляет собой поток частиц с единичной плотностью тока, то квадрат амплитуды рассеянной волны представляет собой плотность потока, рассеянного под соответствующим углом; интеграл этого квадрата по всем значениям угла есть полный рассеянный поток, приходящийся на единичную плотность падающего потока. Этот интеграл имеет размерность площади; он представляет собой эффективную площадь силового поля при рассеянии частиц и называется эффективным сечением упругого рассеяния падающих частиц в данном поле.

Мы изучали рассеяние волн в § 9.3, а в гл. 11 рассмотрели несколько примеров; здесь приемы изучения остаются прежними. Решаем радиальное уравнение (12.3.33) при положительной энергии  $\varepsilon = k^2$  и берем решение  $R$ , равное нулю при  $r = 0$ , которое мало отличается от  $(1/k) \sin(kr - \eta_l - \pi l/2)$  для значений  $r$ , достаточно больших для того, чтобы величиной  $v(r)$  можно было бы пренебречь (мы предполагаем, что  $v$  стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$ ). Распределение по углам рассеянной волны и полное эффективное сечение рассеяния выражаются тогда через фазовые углы  $\eta_l$ , как показано в (11.3.72). (Мы здесь пишем  $\eta_l$  вместо  $\delta_l$ , употреблявшегося там.)

Не все потенциальные поля могут быть рассчитаны этим простым способом. Например, равенство (12.3.41) показывает, что для кулоновского поля фазовые углы не приближаются к асимптотическому значению, но благодаря наличию в асимптотическом выражении логарифмического члена продолжают изменяться, как бы велико ни было  $r$ . Кулоновское поле не приближается к нулю достаточно быстро для того, чтобы радиальные функции могли принять такую же простую форму как  $(1/k) \sin(kr - \eta_l - \pi l/2)$  при  $r \rightarrow \infty$ . Конечно, мы смогли вычислить рассеяние кулоновским полем при помощи параболических координат, и результат показывает, почему нужно осторожно обращаться с рядами: эффективное сечение бесконечно, кулоновское поле влияет на движение частиц даже на бесконечности.

Однако для потенциальных полей, стремящихся к нулю быстрее чем  $1/r$ , фазовый угол в решении имеет некоторое предельное значение, с помощью которого и может быть рассчитано рассеяние, как указано в уравнениях (9.3.18) и (11.3.72). Как пример подобных вычислений, рассчитаем рассеяние электронов с энергией  $E = \hbar^2 k^2 / 2M$ , вызванное полем

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{a} - \frac{Ze^2}{r}, & r < a, \\ 0, & r > a, \end{cases}$$

которое соответствует заряженному ядру с зарядом  $Ze$ , помещенному в начале координат и окруженному нейтрализующей сферической оболочкой при  $r = a$ . Внутри этой сферы множитель, полученный при решении уравнения

$$\frac{d^2 R_l}{dr^2} + \left[ -K^2 + \frac{2MZe^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l = 0, \quad K^2 = \frac{2MZe^2}{\hbar^2 a} - \frac{2ME}{\hbar^2},$$

имеет вид

$$\frac{1}{r} R_l(r) = N (2Kr)^l e^{-Kr} F \left( l+1 - \frac{MZe^2}{\hbar^2 K} \mid 2l+2 \mid 2Kr \right), \quad r < a.$$

Для этих внутренних функций большую роль играет отношение градиента функции  $R_l/r$  к ее значению при  $r = a$ . Пользуясь свойствами вы-

рожденных гипергеометрических функций (см. стр. 626 тома I), получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \Phi_l &= \left[ \frac{r}{R_l/r} \frac{(dR_l/r)}{dr} \right]_{r=a} = \\ &= \frac{MZe^2}{\hbar^2 K} - 1 - Ka + \left( l + 1 - \frac{MZe^2}{\hbar^2 K} \right) \frac{F \left( l + 2 - \frac{MZe^2}{\hbar^2 K} \mid 2l + 2 \mid 2Ka \right)}{F \left( l + 1 - \frac{MZe^2}{\hbar^2 K} \mid 2l + 2 \mid 2Ka \right)}. \end{aligned}$$

Вне сферы  $r = a$  мы пользуемся комбинацией  $\cos \eta_l j_l(kr) + \sin \eta_l n_l(kr)$ , где  $\eta_l$  подобрано так, чтобы отношение производной этой комбинации к ее значению при  $r = a$  было равно аналогичному отношению для внутренних функций. Пользуясь фазовыми углами, определенными в конце гл. 11, имеем<sup>1)</sup>

$$\operatorname{tg} \Phi_l = ka \frac{j_l' \cos \eta_l + n_l' \sin \eta_l}{j_l \cos \eta_l + n_l \sin \eta_l}$$

или

$$\operatorname{tg} \eta_l = \operatorname{tg} \delta_l \frac{\operatorname{tg} \Phi_l + \operatorname{tg} \alpha_l}{\operatorname{tg} \Phi_l + \operatorname{tg} \beta_l} = \operatorname{tg} \gamma_l \frac{\sin(\Phi_l + \alpha_l)}{\sin(\Phi_l + \beta_l)},$$

где углы  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  зависят от  $ka$ , причем  $k^2 = \varepsilon = 2ME/\hbar^2$ .

Мы пользуемся комбинацией внешних и внутренних функций для различных значений  $l$  так, чтобы падающая волна при больших  $r$  соответствовала плоской волне [см. уравнение (9.3.15)]

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \vartheta) j_l(kr).$$

Следовательно, при  $r > a$  падающая волна, сложенная с рассеянной волной, имеет вид

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l P_l(\cos \vartheta) e^{-i\eta_l} [\cos \eta_l j_l(kr) + \sin \eta_l n_l(kr)],$$

как и в уравнении (11.3.71). Рассеянная волна, интенсивность рассеяния и эффективное сечение рассеяния при  $kr \gg 1$  имеют тогда вид

$$\begin{aligned} \psi_s &\simeq -\frac{e^{ikr}}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-i\eta_l} \sin \eta_l P_l(\cos \vartheta), \\ S &= \frac{1}{k^2 r^2} \sum_{l, n} (2l+1)(2n+1) \cos(\eta_l - \eta_n) \sin \eta_l \sin \eta_n \times \\ &\quad \times P_l(\cos \vartheta) P_n(\cos \vartheta), \\ Q &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l. \end{aligned} \quad (12.3.55)$$

Можно отметить, что здесь связь между полным эффективным сечением  $Q$  и асимптотической амплитудой рассеянной волны аналогична уравнению (11.4.64), и о ней упоминалось на стр. 69. Так как равенства (12.3.55) имеют место для любого центрального поля разумного вида,

<sup>1)</sup> Определение фазы  $\eta_l$ , примененное здесь, соответствует асимптотическому поведению величины  $R_l = \sin(kr - l\pi/2 - \eta_l)$ . В квантовой механике, где потенциалы обычно соответствуют притяжению и где волны чаще «притягиваются», чем «отгоняются», как это бывает при наличии препятствия в акустике, более принято это  $\eta_l$  сдвиг фаз обозначать через  $-\eta_l$ .

где фазовые углы  $\eta_l$  определяются этим полем, то разложение фактора углового распределения (амплитуды рассеяния)  $f(\vartheta)$ , определенного соотношением

$$\psi \simeq e^{ikr \cos \vartheta} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta), \quad r \rightarrow \infty,$$

по фазовым углам  $\eta_l$

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-i\eta_l} \sin \eta_l P_l(\cos \vartheta), \quad (12.3.56)$$

а также предельное соотношение между  $f$  и  $Q$ , полученное с помощью сравнения двух рядов,

$$Q = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} [f(0)], \quad (12.3.56)$$

будут верны и в общем случае. В частности, последнее соотношение будет иметь место как в том случае, когда  $f$  и  $Q$  заданы в виде рядов сферических функций, так и при задании их в конечном виде.

В главе 9 на стр. 69 было показано, что равенство (12.3.56') выражает собой не что иное, как закон сохранения числа падающих частиц. Интенсивность первоначального пучка позади рассеивающего центра ( $\vartheta=0$ ) должна быть уменьшена на величину, соответствующую полному числу рассеянных частиц. Рассеянная волна при  $\vartheta=0$  является как раз тенеобразующей волной (см. стр. 357), поэтому полное эффективное сечение должно быть пропорционально той части  $f(0)$ , которая не совпадает по фазе с падающей волной.

**Эффект Рамзауера и другие резонансные эффекты.** В рассмотренном здесь примере фазовые углы зависят от двух безразмерных параметров:  $ka = (a/\hbar) \sqrt{2ME} = Mva/\hbar$ , пропорционального скорости падающей частицы, и  $\beta = \sqrt{MaZe^2/2\hbar^2}$ , который является мерой «интенсивности» поля притяжения и пропорционален квадратному корню из «зарядного фактора»  $Z$  и из радиуса  $a$  поверхности, вне которой  $V=0$ . Оказывается, что при  $k=0$  все фазовые углы  $\eta$  при малом  $\beta$  равны нулю, затем при возрастании  $\beta$  скачком изменяются до  $-\pi$ ,  $-2\pi$  и т. д. При  $k > 0$  углы  $-\eta$  также возрастают вместе с  $\beta$ , но без разрывов, как показано на рис. 12.5. Разрывность при  $k=0$  объясняется поведением связанных уровней для потенциала  $V$ . При очень малых значениях  $\beta$  связанных уровней нет; первый связанный уровень (при  $l=0$ ), расположенный очень близко от края потенциальной ямы, появляется при значении  $\beta$ , чуть большем значения, при котором  $\eta_0$  сразу перескакивает от 0 к  $-\pi$  при  $k=0$ ; для данного  $l$  каждый новый уровень появляется при значении  $\beta$ , чуть большем того значения, при котором  $\eta_l$  совершает подобный скачок.

Поведение фазовых углов, рассматриваемых как функции от  $ka$  при различных значениях  $\beta$ , показано на рис. 12.6. При малых значениях  $ka$  угол  $-\eta_0$  изменяется в зависимости от  $ka$  линейно; для других значений  $l$  при  $ka \ll 1$  имеем  $-\eta_l(ka) \simeq n\pi + \mu_l(ka)^{\nu_l+1}$ , где постоянная  $\mu_l$  стремится к  $\pm \infty$ , когда  $\beta$  приближается к одному из значений, соответствующих точкам разрыва  $\eta_l(0)$ . Следовательно, в выражении  $Q$  остается постоянным при  $ka \rightarrow 0$  только член с  $l=0$ , все остальные члены стремятся к нулю, за исключением тех случаев, когда  $\beta$  имеет значение, при котором  $\mu_l \rightarrow \infty$ : в этом последнем случае эффективное сечение стремится к бесконечности, когда  $k$  приближается к нулю. С другой стороны, для значений  $\beta$ , немного меньших указанных (иначе говоря, когда уровень немного «вытеснен»),  $|\sin \eta_l|$  при убывании  $ka$  сначала растет, а потом уменьшается, и эффектив-

ное сечение также сначала растет, а потом при  $ka \rightarrow 0$  становится очень малым (см. кривые при  $\beta = 1,75$  на рис. 12.6).

Рассмотрим эти утверждения в более общей форме, когда при  $r = a$  отношение производной к значению функции для внутренней функции  $R_l/r$  равно отношению производной  $j_l'$  к значению  $j_l$ ; тогда  $\text{tg } \Phi_l$  равен  $-\text{tg } \alpha_l$ ,

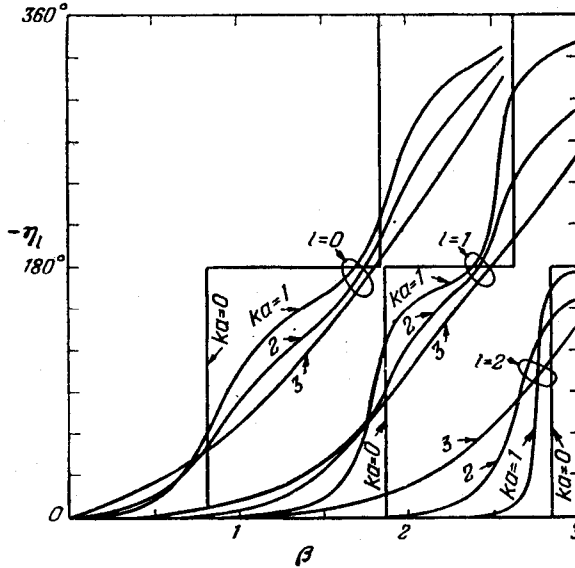


Рис. 12.5. Фазовые углы  $\eta_l$  для рассеяния экранированным кулоновским полем как функции параметра  $\beta$ , характеризующего интенсивность поля при различных значениях скоростного параметра  $ka$ .

и  $\eta_l = 0$ . Это было бы приблизительно верно для энергий, соответствующих допустимому связанному состоянию, если бы кулоновское поле не обрывалось при  $r = a$ , а простиралось бы до бесконечности. Если это происходит при малом  $\varepsilon$  (т. е. если «виртуальный уровень» немного больше нуля), полное эффективное сечение убывает до очень малых значений при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Это явление в случае рассеяния электронов на атомах называется *эффектом Рамзауера*.

Максимумы (называемые *резонансными пиками*) эффективного сечения могут достигаться, когда  $\eta_l = \pi/2$ , что имеет место, как только  $\Phi_l = -\beta_l$ . При максимумах *парциальное эффективное сечение*

$$Q_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \sin^2 \eta_l \underset{\eta_l \rightarrow \pi/2}{\approx} \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1)$$

является наибольшим возможным эффективным сечением. Предположим, что этот максимум достигается при  $\varepsilon = \varepsilon_r$ . В окрестности этого пика

$$\text{ctg } \eta_l \approx \text{ctg } \delta_l \frac{(\varepsilon - \varepsilon_r) \sec^2 \beta_l}{\text{tg } \alpha_l - \text{tg } \beta_l} \left( \frac{d\Phi_l}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon = \varepsilon_r},$$

где углы  $\alpha_l$  и  $\beta_l$  для функций Бесселя даны на стр. 533.

Пользуясь выражением вронскиана

$$j_l n_l - n_l j_l = \frac{1}{ka},$$

получаем

$$\operatorname{tg} \delta_l (\operatorname{tg} \alpha_l - \operatorname{tg} \beta_l) = \frac{1}{n_l^2 (ka)}$$

и

$$\operatorname{ctg} \eta_l \simeq n_l^2 (\varepsilon - \varepsilon_r) \sec^2 \beta_l \left( \frac{d\Phi_l}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_r}.$$

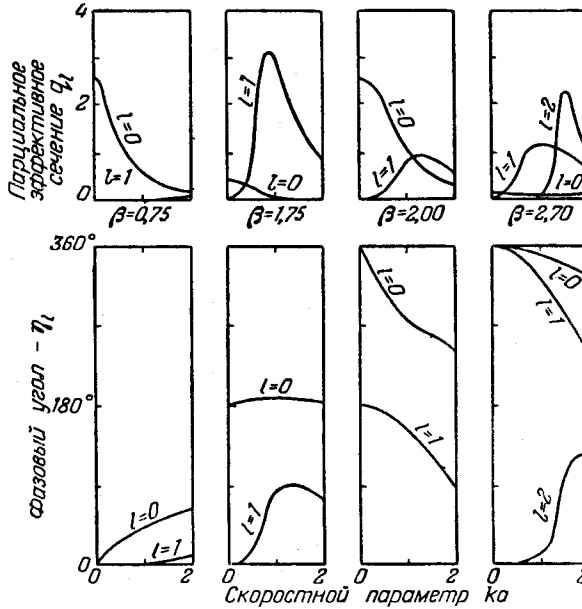


Рис. 12.6. Фазовые углы  $-\eta_l$  и парциальные эффективные сечения  $q_l = (2l+1) \sin^2(\eta_l)/k^2 a^2$  как функции от  $ka$  для различных значений  $l$  и  $\beta$ , иллюстрирующие влияние «виртуальных уровней».

Парциальное эффективное сечение принимает теперь вид типичной резонансной кривой:

$$Q_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{1}{1 + \operatorname{ctg}^2 \eta_l} \simeq \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \frac{4 \cos^4 \beta_l / [n_l^4 (d\Phi_l/d\varepsilon)_{\varepsilon=\varepsilon_r}]}{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + \cos^4 \beta_l / [n_l^4 (d\Phi_l/d\varepsilon)_{\varepsilon=\varepsilon_r}^2]};$$

ширина  $\Gamma$  резонанса равна

$$\Gamma = \frac{2 \cos^2 \beta_l}{n_l^2 (d\Phi_l/d\varepsilon)_{\varepsilon=\varepsilon_r}}.$$

Резонанс будет особенно узким и очень заметным при малых энергиях, так как тогда  $n_l(ka)$  особенно велико. Это заключение, конечно, обусловлено чувствительностью величины  $(d\Phi_l/d\varepsilon)_{\varepsilon=\varepsilon_r}$  к изменениям энергии и имеет силу только в том случае, когда эта производная не стремится быстро к нулю при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Поскольку  $\Phi_l$  описывает состояние во внутренней области  $r \leq a$ ,  $\Phi_l$  будет нечувствительным к изменениям  $\varepsilon$  при малых  $\varepsilon$  только в том случае, когда потенциальная энергия во внутренней области значительно превышает  $\varepsilon$  (это имеет место только в случае, когда кинетическая энергия велика при  $r < a$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ ). Это условие не встречается в рассматриваемой задаче, но играет роль при рассеянии медленных нейтронов ядрами и проявляется в явлениях резонансного рассеяния. Заметим,

что, когда  $l$  возрастает при постоянном  $ka$ , ширина быстро убывает и резонанс становится более резким; в то же время для постоянного  $l$  при возрастании энергии ширина возрастает, так что в конечном итоге сильная флуктуация в  $Q$ , которая приводит к резонансу, исчезает при достаточно большой энергии. Некоторые из этих явлений видны на рис. 12.6, они более заметны при расчетах ядерного рассеяния.

**Приближенные вычисления в случае медленных бомбардирующих частиц.** Если энергия бомбардирующей частицы очень мала (т. е. если  $ka \ll 1$ ), то  $\eta_l \rightarrow 0$  при  $l > 0$  и большая часть рассеянной волны соответствует значению  $l=0$ , т. е. сферически симметричной части. Это имеет место для медленных нейтронов (с энергией, меньшей чем несколько тысяч электрон-вольт), а также для очень медленных электронов (с энергией меньшей чем один электрон-вольт при рассеянии на атомах). В этой области энергий мы должны рассматривать радиальную функцию только при  $l=0$ :

$$\frac{d^2 R_0}{dr^2} + [k^2 - v(r)] R_0 = 0, \quad R_0 \simeq \begin{cases} 0, & r \rightarrow 0, \\ \frac{1}{k} \sin(kr - \eta_l), & r \rightarrow \infty; \end{cases}$$

с этим уравнением проще иметь дело, чем с уравнениями при  $l > 0$ . (В обоих случаях мы пренебрегаем влиянием обмена, усложняющим вычисления; но этим влиянием можно пренебречь для тяжелых атомов и ядер.)

Например, мы можем найти точные решения в нескольких случаях потенциальных функций, для которых при наличии члена  $l(l+1)/r^2$  решение не может быть найдено. В случае, рассмотренном, например, на стр. 620 для потенциала  $V = -Be^{-r/d}$  при  $l=0$  и для положительной энергии  $E = (\hbar^2/2M) k^2$ , решение является линейной комбинацией

$$R_0 = N \left[ \frac{J_{2ikd}(2bde^{-r/2d})}{J_{2ikd}(2bd)} - \frac{J_{-2ikd}(2bde^{-r/2d})}{J_{-2ikd}(2bd)} \right], \quad b^2 = \frac{2MB}{\hbar^2},$$

и стремится к 0 при  $r \rightarrow 0$ , как и должно быть. Постоянная  $N$  подбирается так, чтобы  $R_0$  имело нужное асимптотическое поведение. Но

$$J_{2ikd}(2bde^{-r/2d}) \simeq \frac{1}{\Gamma(1+2ikd)} e^{2ikd \ln(bd) - ikr}, \quad r \rightarrow \infty,$$

а так как

$$\Gamma(1+2ikd) = \sqrt{2\pi kd / \text{sh}(2\pi kd)} e^{i\Omega(2hd)}$$

и

$$J_{2ikd}(2bd) = |J| e^{i\Phi(hd, bd)},$$

то  $N$  можно записать в виде

$$\frac{i}{2k} \sqrt{|J|^2 \frac{2\pi kd}{\text{sh}(2\pi kd)}}$$

и асимптотическая форма  $R_0$  имеет вид

$$R_0 \simeq \frac{1}{k} \sin[kr - 2kd \ln(bd) + \Omega + \Phi], \quad r \rightarrow \infty,$$

что определяет фазовый угол  $\eta_0$ . Для достаточно малых значений энергии только тот член, в котором  $l=0$ , заметно отличается от функции Бесселя  $j_l(kr)$  невозмущенной плоской волны, интенсивность рассеяния

$$S \simeq \frac{1}{k^2 r^2} \sin^2[\Omega + \Phi - 2kd \ln(bd)]$$

не зависит от угла и эффективное сечение рассеяния

$$Q \simeq \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 [\Omega + \Phi - 2kd \ln (bd)]$$

равно точно  $4\pi r^2 S$ .

Если энергия достаточно мала, так что  $kd \ll 1$ , то и гамма-функция и функция Бесселя могут быть упрощены. Например, так как

$$\left[ \frac{d}{dz} \Gamma(z) \right]_{z=1} = -\gamma = -0,5772$$

и

$$\left[ \frac{d}{dv} J_\nu(a) \right]_{\nu=0} = \frac{1}{2} \pi N_0(a),$$

то

$$\Gamma(1 + 2ikd) \simeq 1 - 1,1544 ikd, \quad \Omega \simeq -1,1544 kd, \\ J_{2ikd}(2bd) \simeq J_0(2bd) + \pi ikd N_0(2bd), \quad \Phi \simeq -\pi kd \operatorname{ctg} [\delta_0(2bd)],$$

где  $\operatorname{tg} [\delta_0(x)] = -[J_0(x)/N_0(x)]$ . Следовательно, фазовый угол, соответствующий значению  $l=0$ , в предельном случае малых энергий равен

$$\eta_0 \simeq kd \{ \ln(b^2 d^2) + \pi \operatorname{ctg} [\delta_0(2bd)] + 1,1544 \},$$

а полное эффективное сечение принимает вид

$$Q \simeq 4\pi d^2 \{ 1,1544 + \ln(b^2 d^2) + \pi \operatorname{ctg} [\delta_0(2bd)] \}^2. \quad (12.3.57)$$

Наконец, если  $2bd$  много меньше единицы (потенциальная яма мелка или узка или и то и другое вместе), то  $\operatorname{ctg} \delta_0 \simeq -\frac{2}{\pi} [\ln(bd) + \gamma - (bd)^2]$ . Фазовый угол  $\eta_0$  тогда равен

$$\eta_0 \simeq -2kd (bd)^2, \quad 2bd \ll 1$$

и

$$Q \simeq 16\pi d^2 (bd)^4, \quad 2bd \ll 1.$$

Этот результат, очевидно, согласуется со значением  $\eta_0$ , полученным с помощью теории возмущений, когда влияние взаимодействия предполагается малым. Полученный с помощью теории возмущений результат называется *борновским приближением* и рассматривается непосредственно ниже.

**Приближение Борна.** При достаточно слабых полях или при достаточно больших скоростях частиц все рассеивающее поле можно представлять себе как возмущение, видоизменяющее падающую плоскую волну, рассматривая правую часть уравнения

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = \frac{2M}{\hbar^2} V(r) \psi, \quad k = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}} = \frac{Mv}{\hbar},$$

как неоднородный член и «решая» его с помощью функции Грина. Если падающая волна является плоской волной с амплитудой, равной единице,  $e^{ikz}$ , то соответствующее интегральное уравнение для  $\psi$  имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{M}{2\pi\hbar^2} \iint \int \frac{e^{ikR}}{R} V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d\nu_0, \quad (12.3.58)$$

где  $R = \sqrt{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \Omega}$  — расстояние между  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{r}_0$ ,  $\Omega$  — угол между этими векторами. Конечно,  $e^{ikz}$  можно заменить любым другим решением однородного уравнения Гельмгольца, которое, как мы знаем, будет соответствовать другим возможным падающим волнам.



Это интегральное уравнение в случае сходимости интеграла может быть решено методом последовательных приближений. Если интеграл сходится абсолютно, т. е. если  $\int |V| dv$  конечен, то полученный ряд итераций может сходиться (см. стр. 72), но даже в случае расходимости несколько первых членов последовательности иногда дают чрезвычайно хорошее приближение. Подробное изучение интеграла показывает, что критерий быстроты сходимости итераций может быть выражен через длину волны де Бройля  $\lambda = \hbar/Mv = 2\pi/k$  и расстояние  $r_c$ , на которое может приблизиться частица к силовому центру в поле отталкивания  $|V(r)|$  ( $r_c$  есть корень уравнения  $|V(r)| = E$ ). Первое приближение решения уравнения (12.3.58), как оказывается, будет достаточным при  $\lambda \gg r_c$ ; оно часто будет достаточным также и тогда, когда это условие не выполняется.

Изучение значения  $\psi$  при  $r=0$  часто позволяет решить вопрос о том, будут ли несколько первых приближений достаточно близки к решению. Первое приближение для  $\psi$  получается, если подставить  $e^{ikr}$  вместо  $\psi$  под знак интеграла в уравнение (12.3.58). При  $r=0$  первым приближением является

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int \int \int \frac{e^{ikr(1+\cos\theta)}}{r} V(r) r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi = \\ &= -\frac{2M}{k\hbar^2} \int_0^\infty V(r) e^{ikr} \sin(kr) \, dr; \end{aligned}$$

если  $\psi_1(0)$  мало сравнительно с единичной амплитудой падающей плоской волны, то  $\psi_1(r)$  будет, вероятно, малым и при  $r > 0$ . Если теперь  $V(r) \simeq A/r^\alpha$  при  $r \rightarrow 0$  и  $V \simeq B/r^\beta$  при  $r \rightarrow \infty$ , то для того, чтобы интеграл сходился для любого значения  $k$ ,  $\alpha$  должно быть меньше 2 (сила вблизи начала не может быть обратной кубу расстояния), а для того, чтобы интеграл оставался конечным и при  $k \rightarrow 0$ ,  $\beta$  должно быть больше 1 на больших расстояниях сила должна убывать быстрее, чем величина, (обратная квадрату расстояния).

Если эти предельные требования удовлетворены и если  $(2M/\hbar^2) \int V(r) r \, dr$  мало по сравнению с единицей, то первое приближение будет малым для всех значений  $k$  (и дальнейшие приближения будут соответственно меньше). Если  $k$  возрастает, интеграл по величине убывает, так как подинтегральная функция колеблется все быстрее и быстрее благодаря наличию множителя  $e^{ikr} \sin(kr)$ . Если  $V$  при возрастании  $r$  стремится к нулю монотонно, то  $\psi_1(0)$  будет, вообще говоря, меньше интеграла по  $r$  в пределах от 0 до первого корня функции  $\sin kr$ :

$$|\psi_1(0)| \leq \frac{2M}{\hbar^2} \int_0^{\pi/k} V(r) r \, dr.$$

Если  $V(r) \simeq A/r$  при  $r \rightarrow 0$  и  $V \leq A/r^\beta$  ( $\beta > 1$ ) при  $r \rightarrow \infty$ , то  $\psi_1(0) \leq 2\pi M A / k \hbar^2 = 2\pi A / v \hbar$ . Но расстояние наибольшего приближения  $r_c$ , упомянутое выше на этой странице, приближенно определяется приравнением кинетической энергии  $\frac{1}{2} M v^2$  значению  $|V|$  при  $r = r_c$ . Для высоких энергий  $|V| \simeq A/r$ , так что  $r_c \simeq 2A/Mv^2$ , или  $A \simeq Mv^2 r_c / 2$ ; поэтому признак того, что  $\psi_1(0)$  мало, заключается в том, чтобы  $\pi M v r_c / \hbar = 2\pi^2 r_c / \lambda$  было мало; здесь  $\lambda = 2\pi\hbar/Mv$  — длина волны де Бройля падающей частицы. Таким образом, в этом примере мы пришли к нашему требованию, что итерации приближений сходятся при  $r_c < \lambda/2\pi$  и что первое при-

ближение будет достаточным, когда  $r_c$  значительно меньше чем  $\lambda/2\pi$  (см. рассуждение на стр. 90).

Если первое приближение достаточно, нам не потребуется вычислять  $\psi$  вблизи центра сил. Для подсчета рассеяния нужна только асимптотическая форма  $\psi$ . Если  $r$  много больше чем  $r_0$ , то

$$\frac{e^{ikR}}{R} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ikr_0 \cos \Omega}, \quad r \gg r_0.$$

Если  $\mathbf{k}_s$  — вектор величины  $k$ , направленный параллельно  $\mathbf{r}$  — направлению движения рассматриваемой нами части рассеянного пучка, то  $kr_0 \cos \Omega = \mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0$ . Также и падающая плоская волна может быть записана в виде  $e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$ , где  $\mathbf{k}_i$  — вектор, характеризующий падающий пучок. Тогда асимптотическая форма первого приближения для  $\psi$  имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \frac{Me^{ikr}}{2\pi\hbar^2 r} \iint e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \cdot \mathbf{r}_0} V(r_0) dv_0. \quad (12.3.58')$$

Эта формула известна как *приближение Борна*. В области ее применимости она замечательно проста и полезна. Она устанавливает, что рассеянная волна на очень большом расстоянии от рассеивателя имеет амплитуду, равную произведению  $V\sqrt{2\pi M/\hbar^2 r}$  на *преобразование Фурье рассеивающего потенциала*  $V$  относительно разности векторов  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ . Так как величина и  $\mathbf{k}_i$  и  $\mathbf{k}_s$  равна  $k = Mv/\hbar$ , то величина вектора  $\mathbf{K}$  равна  $\mu = 2k \sin(\vartheta/2)$ , где  $\vartheta$  — *угол рассеяния*, угол между  $\mathbf{k}_s$  и  $\mathbf{k}_i$ . Мы также видим, что  $\mathbf{K}$  есть произведение  $1/\hbar$  на импульс, сообщаемый частицей центру сил в течение процесса рассеяния.

Так как  $V(r)$  сферически симметричен, то можно проинтегрировать по углам, что дает

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &\simeq e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mu), & \mu &= \frac{2Mv}{\hbar} \sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right), \\ f(\mu) &\simeq -\frac{2M}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r_0) \frac{\sin(\mu r_0)}{\mu r_0} r_0^2 dr_0. \end{aligned} \quad (12.3.59)$$

Функция  $f$  является относительной амплитудой той части пучка, которая рассеивается на угол  $\vartheta$ . Интеграл от ее квадрата по всем углам равен полному эффективному сечению  $Q$ . Заметим, что в этом приближении функция  $f$  (а также и  $|f|^2 = S$  — функция углового распределения) зависит от скорости бомбардирующей частицы  $v$  и от угла рассеяния  $\vartheta$  только через величину  $\mu = (2Mv/\hbar) \sin(\vartheta/2)$ . Как указано выше, эта формула для  $f$  пригодна для достаточно больших  $\mathbf{K}$ . Например, для потенциала, рассмотренного на стр. 631, мы найдем, что выводы, полученные из (12.3.59), очень мало отличаются от точного решения, полученного на стр. 632, если только  $\mu$  несколько больше чем  $2Ze^2/M\hbar^2$ .

Во многих случаях потенциальное поле, вызывающее рассеяние, порождено атомным ядром с зарядом  $Ze$ , окруженным сферически-симметричным распределением электронов  $\rho(r)$  в количестве, достаточном для того, чтобы сделать атом нейтральным. В этом случае потенциальная функция имеет вид

$$V(r) = -\frac{4\pi}{r} \int_r^\infty \rho(r') r'^2 dr' + 4\pi \int_r^\infty \rho(r') r dr', \quad 4\pi \int_0^\infty \rho(r') r'^2 dr' = Ze^2.$$

Подставляя это в выражение для амплитуды рассеяния и интегрируя

по частям, получим

$$f(\mu) \simeq \frac{2MZe^2}{\mu^2 \hbar^2} [F(0) - F(\mu)], \quad F(\mu) = \frac{4\pi}{Ze^2} \int_0^\infty \rho(r) \frac{\sin(\mu r)}{\mu r} r^2 dr, \quad (12.3.60)$$

где  $F(0) = 1$  согласно определению заряда электронов для нейтрального атома. Функция  $F(\mu)$  называется *структурным фактором* распределения зарядов<sup>1)</sup>.

Если  $\mu$  достаточно велико, так что  $1/\mu$  мало сравнительно с «радиусом» атома (значением  $r$ , внутри которого находится около трех четвертей заряда электронов), то  $F(\mu)$  мало сравнительно с  $F(0) = 1$ . В этой области амплитуда рассеяния имеет вид

$$f(\mu) \simeq f_R(\mu) = \frac{2MZe^2}{\hbar^2 \mu^2} = \frac{Ze^2}{2Mv^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)}, \quad F(\mu) \ll 1;$$

квадрат этой величины есть, согласно формуле Резерфорда, угловое распределение рассеяния заряженных частиц кулоновским полем ядра с зарядом  $Ze$ . В этом первом приближении, если только бомбардирующие частицы достаточно быстры ( $v$  велико) и проходят достаточно близко для того, чтобы быть рассеянными на значительный угол ( $\vartheta$  достаточно велико), частицы практически не реагируют на распределение заряда электронов  $\rho$ , а рассеиваются преимущественно центральным ядром.

С другой стороны, если произведение  $\mu$  на «радиус» атома мало сравнительно с единицей (для медленных бомбардирующих частиц или для скользящих столкновений), мы можем  $\sin(\mu r)/\mu r$  под знаком интеграла для  $F(\mu)$  разложить в ряд, что дает

$$F(\mu) \simeq 1 - \mu^2 \frac{2\pi}{3Ze^2} \int_0^\infty \rho(r) r^4 dr, \quad \mu \rightarrow 0,$$

и предельные значения функции  $f(\mu)$  и эффективного сечения рассеяния  $Q$  (приблизительно равного  $4\pi |f|^2$  при малом  $\mu$ ) принимают вид

$$f(\mu) \simeq \frac{1}{3} Z \frac{r_a^2}{a_0}, \quad Q \simeq \frac{4\pi}{9} \frac{Z^2 r_a^4}{a_0^2},$$

где

$$r_a^2 = \frac{4\pi}{Ze^2} \int_0^\infty \rho(r) r^4 dr$$

есть средний квадрат расстояния электронов от ядра и где  $a_0 = \hbar^2/Me^2 = 0,532 \cdot 10^{-8}$  см есть «радиус первой борвской орбиты» для атома водорода. Предельное эффективное сечение для очень медленных бомбардирующих частиц таким образом пропорционально квадрату заряда ядра и четвертой степени «среднего квадратичного радиуса атома»  $r_a$ , если приближение Борна пригодно в этом предельном случае. Заметим, что в этом приближении рассеяние будет одним и тем же как для полей отталкивания, так и для равных по величине, но противоположных по знаку полей притяжения.

Величина  $1 - F(\mu) = f(\mu)/f_R(\mu)$  является, следовательно, отношением истинной амплитуды рассеяния к резерфордовской амплитуде при одном и том же угле рассеяния и одном и том же заряде ядра. Если применимо приближение Борна, то  $1 - F$  является функцией только от

<sup>1)</sup> Функцию  $ZF(\mu)$  называют обычно атомным фактором рассеяния. — *Прим. ред.*

$\mu = (2Mv/\hbar) \sin \vartheta/2$  и от распределения электронного заряда по радиусу. Эта величина возрастает как  $\mu^2$  при малых  $\mu$  и довольно гладко возрастает, стремясь к асимптотическому значению — единице, когда  $\mu$  очень велико. Эта функция может быть найдена экспериментально с помощью измерения рассеяния на данном атоме электронов (или протонов) с высокими скоростями. И так как  $F$  является преобразованием Фурье плотности заряда электронов, то мы можем получить  $\rho$  и  $V$ , пользуясь известной из эксперимента  $F(\mu)$ . Имеем

$$\rho(r) = \frac{Ze^2}{2\pi^2 r} \int_0^\infty F(\mu) \sin(\mu r) \mu d\mu, \quad F(\mu) = 1 - \frac{f(\mu)}{f_R(\mu)},$$

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2}{\pi M r} \int_0^\infty \sin(\mu r) [f(\mu) - f_R(\mu)] \mu d\mu, \quad (12.3.61)$$

где  $f(\mu)$  — амплитуда рассеянной волны, определенная в равенстве (12.3.59), а  $f_R(\mu) = 2MZe^2/\hbar^2 \mu^2$  — амплитуда резерфордского рассеяния. Следовательно, зная амплитуду рассеяния  $f$  при всех значениях  $\mu$  и зная  $Z$ , мы можем подсчитать и  $\rho$  и  $V$  (с точностью, присущей приближению Борна).

**Приближение Борна для фазовых углов.** В некоторых случаях потенциальная функция слишком велика для того, чтобы ее можно было рассматривать с помощью приближения Борна первого порядка, тем не менее только фазовый угол  $\eta_0$ , соответствующий значению  $l=0$ , является большим членом в точном решении уравнения (12.3.56). Это часто имеет место в задачах ядерного рассеяния, когда потенциальная яма достаточно узка и глубока. В этом случае мы решаем радиальное уравнение (12.3.33) для каждого  $l$  настолько точно, насколько это возможно. Например, при  $l=0$  мы могли бы начать с невозмущенной формы, соответствующей одному из потенциалов, для которых мы имеем точные решения и которые были рассмотрены на стр. 620 и следующих, тогда как при других значениях  $l$  можно использовать сферические функции Бесселя. Если  $V(r)$  мало отличается от  $V_0(r)$ , для которого при  $l=0$  можно найти точное выражение радиальной функции из уравнения

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[ k^2 - \frac{2M}{\hbar^2} V_0(r) \right] R = 0,$$

то можно положить  $V(r) = V_0(r) + V_1(r)$ . Обозначим через  $y_{01}(r)$  то решение этого уравнения, которое стремится к нулю при  $r \rightarrow 0$  и имеет асимптотическую форму

$$y_{01}(r) \simeq \sin(kr - \Phi_0), \quad r \rightarrow \infty;$$

через  $y_{02}(r)$  обозначим второе решение, независимое от первого, имеющее асимптотическую форму

$$y_{02}(r) \simeq -\cos(kr - \Phi_0), \quad r \rightarrow \infty,$$

и обычно расходящееся при  $r=0$ . Заметим, что определитель Вронского этих решений равен  $k$ .

Уравнение, которое мы желаем решить при  $l=0$ , имеет, таким образом, вид

$$\frac{d^2 R_0}{dr^2} + \left[ k^2 - \frac{2M}{\hbar^2} V_0(r) \right] R_0 = \frac{2M}{\hbar^2} V_1(r) R_0.$$

Если это уравнение истолковать как неоднородное, то формула

(5.2.19) показывает, что интегральное уравнение для  $R_0$  имеет вид

$$R_0(r) = a_0 y_{01}(r) - \int_0^r K_0(r|r_0) R_0(r_0) dr_0,$$

где

$$K_0(r|r_0) = \frac{2M}{k\hbar^2} [y_{01}(r) V_1(r_0) y_{02}(r_0) - y_{02}(r) V_1(r_0) y_{01}(r_0)].$$

Решаем это уравнение методом последовательных итераций, принимая за «нулевое» приближение  $a_0 Y_{00} = a_0 y_{01}$ ; тогда следующее приближение имеет вид  $a_0 Y_{01} = -a_0 \int K_0 Y_{00} dr_0$  и, вообще,

$$R_0(r) = a_0 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m Y_{0m}(r), \quad Y_{00}(r) = y_{01}(r),$$

$$Y_{0m}(r) = \int_0^r K_0(r|r_0) Y_{0,m-1}(r_0) dr_0,$$

или

$$R_0(r) = a_0 \frac{2M}{k\hbar^2} \left[ y_{01}(r) \sum_{m=0}^{\infty} F_{m1}(r) - y_{02}(r) \sum_{n=1}^{\infty} F_{n2}(r) \right],$$

$$F_{01} = \frac{k\hbar^2}{2M}, \quad F_{m1}(r) = (-1)^m \int_0^r V_1(r_0) y_{02}(r_0) Y_{0,m-1}(r_0) dr_0,$$

$$F_{n2}(r) = (-1)^n \int_0^r V_1(r_0) y_{01}(r_0) Y_{0,n-1}(r_0) dr_0.$$

Когда  $r \rightarrow \infty$ ,  $V_1(r_0)$  достаточно быстро стремится к нулю, так что все функции  $F$  стремятся асимптотически к постоянным величинам (в противном случае последовательные приближения вообще расходятся) и при  $r \rightarrow \infty$

$$R_0(r) \simeq b_0 \sin(kr - \eta_0),$$

где

$$b_0 = a_0 \frac{2M}{k\hbar^2} \left\{ \left[ \sum F_{m1}(\infty) \right]^2 + \left[ \sum F_{n2}(\infty) \right]^2 \right\}^{1/2}$$

и

$$\eta_0 = \Phi_0 - \arctg \frac{\sum F_{n2}(\infty)}{\sum F_{m1}(\infty)}.$$

Угол<sup>1)</sup>  $\eta_0$  — фазовый угол, который должен быть подставлен в первый член правой части (12.3.56). Если  $V_1$  достаточно мало по сравнению с  $V_0$ , необходимо вычислить только  $F_{12}(\infty)$ ; членами высшего порядка можно пренебречь; в этом случае уравнения для  $R_0$  и  $\eta_0$  принимают вид

$$R_0(r) \simeq a_0 \sin(kr - \eta_0), \quad r \rightarrow \infty, \quad (12.3.62)$$

$$\eta_0 \simeq \Phi_0 + \arctg \left\{ \frac{2M}{k\hbar^2} \int_0^{\infty} V_1(r_0) [y_{01}(r_0)]^2 dr_0 \right\},$$

<sup>1)</sup> См. примечание на стр. 632.

что может быть подсчитано, если только известны  $\Phi_0$  и первое решение  $y_{01}(r)$ .

Члены равенства (12.3.56), соответствующие значениям  $l > 0$ , также могут быть вычислены аналогичным способом. Однако во многих случаях высшие фазовые углы могут быть подсчитаны с достаточной точностью, если считать возмущением всё  $V$ . Другими словами, мы полагаем  $V_0 = 0$ ; тогда два решения радиального уравнения при  $l > 0$  имеют вид

$$y_{11}(r) = kr j_l(kr) \simeq \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right),$$

$$y_{12}(r) = kr n_l(kr) \simeq -\cos\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right).$$

В этом случае способом, аналогичным тому, который привел нас к уравнениям (12.3.62), и ограничиваясь при решении интегрального уравнения для  $R_l$  последовательными приближениями первого порядка, получим

$$R_l(r) \simeq a_l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi - \eta_l\right) \quad r \rightarrow \infty,$$

$$\eta_l \simeq \text{arctg} \left\{ \frac{2Mk}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r_0) [j_l(kr_0)]^2 r_0^2 dr_0 \right\}. \quad (12.3.63)$$

Если величина потенциальной энергии  $V(r)$  при  $r > r_0$  значительно меньше чем  $\hbar^2 k^2 / 2M$ , то для всех значений  $l$ , больших чем  $kr_0$ , сферические функции Бесселя в интеграле для  $\eta_l$  могут быть заменены первыми членами их разложений в ряды:

$$j_l(kr_0) \simeq \frac{(kr_0)^l}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)}.$$

Это можно сделать во всей части промежутка интегрирования, где  $V(r_0)$  велико. В этом случае имеет место даже более простая формула

$$\eta_l \simeq \frac{(2M/\hbar^2) k^{2l+1}}{[1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2l+1)]^2} \int_0^{r_0} V(r_0) r_0^{2l+2} dr_0.$$

Для обычно встречающихся форм  $V$  это выражение численно очень быстро убывает при возрастании  $l$ .

Можно показать, что приближение Борна (12.3.59) и амплитуда рассеяния, полученная из формулы (12.3.63) для  $\eta_l$ , тождественны. Для этой цели нам потребуется разложение функции  $(\sin \mu r) / \mu r$  по полиномам Лежандра от угла  $\vartheta$  между  $\mathbf{k}_i$  и  $\mathbf{k}_s$ ; это разложение можно получить, взяв мнимую часть разложения функции  $e^{i\mu r} / \mu r$  (см. таблицу в конце гл. 11):

$$\frac{\sin \mu r}{\mu r} = \sum_l (2l+1) P_l(\cos \vartheta) j_l^2(kr).$$

Подставляя это в равенство (12.3.59), получаем

$$\psi_s = -\frac{2M}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_l (2l+1) P_l(\cos \vartheta) \int_0^\infty j_l^2(kr_0) V(r_0) r_0^2 dr_0.$$

Сравним это с (12.3.55), где положим  $\eta_l \ll 1$ , т. е. с выражением

$$\psi_s = -\frac{e^{ikr}}{kr} \sum_l (2l+1) \eta_l P_l(\cos \vartheta).$$

При подстановке в это равенство вместо  $\eta_l$  его выражения из (12.3.63), полученного в предположении, что  $\eta_l \ll 1$ , мы найдем выражение, в точности равное результату, полученному из разложения приближения Борна по функциям Лежандра, приведенному выше.

В качестве примера рассмотрим рассеивающий потенциал

$$V(r) = -Be^{-r/d}.$$

Здесь применение приближения Борна (12.3.63) требуется только при  $l > 0$ , так как для  $l=0$  на стр. 636 было получено точное решение:

$$\eta_0 = 2kd \ln(bd) - \Omega - \Phi, \quad b^2 = \frac{2MB}{\hbar^2},$$

$$\eta_l \simeq \begin{cases} 2kd \left\{ \ln(bd) + 0,5772 + \frac{1}{2} \pi \operatorname{ctg} [\delta_0(2bd)] \right\}, & kd \ll 1, \\ -0,2319kd, & kd \ll 1, \quad bd \ll 1. \end{cases}$$

Для того чтобы получить приближенные формулы для фазовых углов (см. стр. 533) при значениях  $l > 0$ , мы применяем равенства (12.3.63):

$$\begin{aligned} \eta_l &\simeq -b^2 k \int_0^\infty e^{-r/d} [J_l(kr)]^2 r^2 dr = \frac{b^2}{2k} \frac{d}{d(1/d)} Q_l \left( \frac{1+2k^2 d^2}{2k^2 d^2} \right) = \\ &= \frac{-(ld^3 b^2)}{k(1+4k^2 d^2)} \left\{ Q_{l-1} \left( 1 + \frac{1}{2k^2 d^2} \right) - \left( 1 + \frac{1}{2k^2 d^2} \right) Q_l \left( 1 + \frac{1}{2k^2 d^2} \right) \right\} \simeq \\ &\simeq -b^2 d^2 (kd)^{2l+1} \frac{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2l+2)}{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2l+1)}, \quad kd \ll 1. \end{aligned}$$

Последняя формула обеспечивает достаточную сходимость рядов в равенствах (12.3.55) для интенсивности рассеяния и эффективного сечения, если только  $kd < 1/2$ . Если  $kd$  много больше единицы, рассеяние может быть подсчитано с помощью формул приближения Борна (12.3.59). При промежуточных значениях  $kd$  точное выражение для  $\eta_0$  и формулы, выражающие  $\eta_l$  через функции Лежандра второго рода, приводят к весьма точным рядам для  $S$  и  $Q$ . Так как применение равенства (12.3.63) ко всем  $\eta_l$  равносильно приближению Борна (12.3.59), эффективное сечение может быть записано в виде  $Q_B + (4\pi/k^2)(\sin^2 \eta_0 - \sin^2 \eta_0^B)$ , где  $Q_B$  — приближение Борна для эффективного сечения, а  $\eta_0^B$  дается равенством (12.3.63) при  $l=0$ .

**Вариационный метод.** Метод вариации параметров, рассмотренный в гл. 9, может быть использован для подсчета с произвольной точностью волновых функций и энергий для связанных состояний или рассеяния свободных частиц, если мы выберем пробную функцию с достаточным количеством параметров. В качестве примера применения этого метода мы выполним вариационные расчеты для центральной силы притяжения вида  $V(r) = -Be^{-r/d}$ , для которой мы уже произвели некоторые вычисления.

Для связанных состояний мы обычно ищем минимум энергии. Предположим, что нормированная волновая функция  $\varphi(\alpha, \beta, \dots, \mathbf{r})$  обладает нужными общими свойствами (нормирована, конечна, симметрична относительно начала для наимизшего состояния и т. д.), и в пределах, допускаемых общими требованиями, подробности ее формы определены параметрами  $\alpha, \beta, \dots$ . Подсчитаем интеграл

$$\begin{aligned} J(\alpha, \beta, \dots) &= \iiint \left[ (\operatorname{grad} \varphi)^2 + \frac{2M}{\hbar^2} V \varphi^2 \right] dv = \\ &= \iiint \left[ -\varphi \nabla^2 \varphi + \frac{2M}{\hbar^2} V \varphi^2 \right] dv, \quad (12.3.64) \end{aligned}$$

являющийся функцией параметров  $\alpha, \beta, \dots$ . Минимальное значение  $J$  дает тогда наилучшее возможное при выбранной форме  $\varphi$  значение произведения  $2M/\hbar^2$  на допустимую энергию связанного состояния ( $2ME/\hbar^2 = \epsilon$ ). Это наилучшее значение всегда больше точного значения. Так как форма функции  $\varphi$  становится более гибкой при прибавлении новых вариационных параметров, то приближенное значение энергии, полученное вариационным методом, приближается к точному, рассмотренному выше. Таким образом, значения параметров, для которых  $J$  достигает минимума, делают  $\varphi$  настолько близкой к точному решению  $\psi$  уравнения Шредингера

$$\nabla^2 \psi + \left[ \epsilon - \frac{2M}{\hbar^2} V \right] \psi = 0,$$

насколько это возможно в пределах выбранной формы функции  $\varphi$ .

Ряд соображений оказывает влияние на выбор формы  $\varphi$ . Довольно важным фактором является симметрия; если  $V$  — поле центральной силы,  $\varphi$  для наинизшего состояния должна быть симметрична относительно начала, функции  $\varphi$  для более высоких состояний должны быть к ней ортогональны и т. д. Эта функция должна также иметь асимптотическое поведение, очень близкое к поведению  $\psi$ ; если  $V$  при  $r > r_v$  настолько мало по сравнению с  $|E| = |\hbar^2 \epsilon / 2M|$ , что им можно пренебречь, то  $\psi \simeq A \exp(-\sqrt{-\epsilon} r)$  при  $r > r_v$ . Наконец (и это не наименее важно),  $\varphi$  должна быть выбрана по форме такой, чтобы необходимые вычисления не вызывали слишком больших трудностей.

Простейшей формой волновой функции основного состояния является простая экспонента

$$\varphi(\alpha, r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r}, \quad \int \int \int \varphi^2 dv = 1.$$

В этом случае мы жертвуем нужным нам асимптотическим поведением ради простоты формы. Если  $V = -Be^{-r/d}$ , то интеграл, минимум которого мы ищем, имеет вид

$$J(\alpha) = \alpha^2 - \frac{b^2 \alpha^3}{\left(\alpha + \frac{1}{2} \delta\right)^3}, \quad b^2 = \frac{2MB}{\hbar^2}, \quad \delta = \frac{1}{d}.$$

Решение уравнения  $dJ/d\alpha = 0$  приводится тогда к разысканию действительных положительных корней уравнения четвертой степени

$$\left(\alpha + \frac{1}{2} \delta\right)^4 = \frac{3}{4} b^2 \delta \alpha,$$

которое может быть решено графически, алгебраически или приближенными методами. Например, если  $b \gg \delta$  (глубокая и широкая потенциальная яма), то

$$\alpha \simeq \left(\frac{3}{4} b^2 \delta\right)^{1/3} - \frac{2}{3} \delta, \quad J \simeq -b^2 + 3 \left(\frac{3}{4} b^2 \delta\right)^{2/3},$$

или

$$E \simeq -B + 3,931 \left(\frac{\hbar^2 B}{8d^2 M}\right)^{1/3},$$

что можно сравнить с приближением к точному решению, данному равенством (12.3.44). Энергия, подсчитанная вариационным методом при использовании этой пробной функции, дает слишком высокое значение энергии наинизшего состояния, превышающее примерно на 5% расстояние уровня от дна ямы  $-B$ .

Другая форма функции  $\varphi$ , несколько более гибкая, имеет вид

$$\varphi(\alpha, \beta; r) = \sqrt{\frac{\alpha\beta(\alpha+\beta)}{2\pi(\beta-\alpha)^2}} \frac{1}{r} [e^{-\alpha r} - e^{-\beta r}],$$



где, не нарушая общности, можно предположить, что  $\beta > \alpha$ . Соответствующий интеграл

$$J(\alpha, \beta) = \alpha\beta - \frac{4b^2\alpha\beta(\alpha+\beta)}{(2\alpha+\delta)(\alpha+\beta+\delta)(2\beta+\delta)}$$

должен достигать минимума, конечно, относительно обеих величин  $\alpha$  и  $\beta$ ; приравняв нулю частные производные  $J$  по  $\alpha$  и по  $\beta$  и решив полученную систему уравнений относительно  $\alpha$  и  $\beta$ , мы найдем допустимую энергию, подставив найденные значения снова в  $J$ . Это требует решения системы уравнений

$$\begin{aligned} (2\alpha+\delta)^2(\alpha+\beta+\delta)^2(2\beta+\delta)^2 &= 4b^2\delta(2\alpha+\delta)[3\beta^2+2\beta(\alpha+\delta)+\alpha(\alpha+\delta)] = \\ &= 4b^2\delta(2\beta+\delta)[3\alpha^2+2\alpha(\beta+\delta)+\beta(\beta+\delta)]; \end{aligned}$$

выписанная система может быть решена численно; более трудно алгебраическое решение.

Другая возможность заключается в варьировании только параметра  $\beta$ , используя параметр  $\alpha$  для обеспечения надлежащего асимптотического поведения. Другими словами, мы требуем, чтобы  $\alpha$  было равно  $\sqrt{-\varepsilon}$  или в первом приближении корню квадратному из взятого со знаком минус минимального значения интеграла  $J$ . Таким образом, мы для определения  $\alpha$  и  $\beta$  снова получаем два совместных уравнения. Первое получается из требования, чтобы  $J$  достигал минимума относительно  $\beta$  ( $\partial J/\partial\beta = 0$ )

$$(2\alpha+\delta)(\alpha+\beta+\delta)^2(2\beta+\delta) = 4b^2\delta[3\beta^2+2\beta(\alpha+\delta)+\alpha(\alpha+\delta)],$$

второе — из требования, чтобы  $J$  был равен  $-\alpha^2$  при условии, что удовлетворяется первое уравнение,

$$(2\alpha+\delta)(\alpha+\beta+\delta)(2\beta+\delta) = 4b^2\beta.$$

Эту систему совместных уравнений иногда проще решить, чем первую; она дает результаты, близкие к точным. Кроме того, закончив вычисление  $\alpha$  и  $\beta$ , мы будем иметь лучшее значение для  $J$ , в точности равное  $-\alpha^2$ .

Решение имеет вид  $\beta = \sqrt{\frac{1}{2}\delta(\alpha+\delta)}$ . Соответствующее соотношение между энергией связи и глубиной, если вспомнить, что  $\delta = 1/d$ , имеет вид

$$(2bd)^2 = (2xd+1)[1+\sqrt{2(1+ad)}]^2, \quad \alpha = \sqrt{-\varepsilon}.$$

Сравнивая это с точным соотношением  $J_{2ad}(2bd) = 0$ , находим, что полученное равенство дает превосходные результаты при  $ad < 1$ , так как ошибка при  $ad = 4$  составляет 3%, а при  $ad = 0$  — только 2/3%. Для больших значений  $ad$  предпочтительнее выражение (12.3.44).

Как можно улучшить этот результат? Можно, конечно, прибавить дополнительные члены вида  $(1/r)[e^{-\alpha r} - e^{-\beta r}]$ , а также можно, например, воспользоваться выражением

$$\frac{1}{r}\{[e^{-\alpha r} - e^{-\beta r}] + C[e^{-\alpha r} - e^{-\gamma r}]\},$$

где  $C$  и  $\gamma$  так же, как и  $\beta$ , являются варьируемыми параметрами. Однако эта процедура быстро становится очень громоздкой; прибавление нескольких членов такого рода требует решения вековых уравнений для различных групп значений нелинейных параметров  $\beta$ ,  $\gamma$  и других, входящих в дополнительные члены. Другой способ, вариационно-итерационный метод, излагаемый ниже, более экономичен и имеет дополнительное преимущество, состоящее в том, что, кроме верхних границ, даваемых обычно вариационным методом, он дает также и нижнюю границу для  $(bd)^2$ .

**Вариационно-итерационный метод.** Мы вернемся к методу, описанному в гл. 9, стр. 133, приспособив обозначения к уравнению Шредингера для связанного состояния в поле центрального потенциала притяжения. Пусть при  $l=0$ ,  $\psi = R/r$ , где  $R$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + [-\kappa^2 + b^2 u(r)] R = 0, \quad \kappa^2 = -\varepsilon.$$

Первым шагом является превращение этого уравнения в интегральное уравнение с помощью функции Грина:

$$\frac{d^2}{dr^2} G_\kappa(r|r') - \kappa^2 G_\kappa(r|r') = -\delta(r-r'),$$

$$G_\kappa = \frac{1}{\kappa} \begin{cases} \text{sh}(\kappa r) e^{-\kappa r'}, & r < r', \\ \text{sh}(\kappa r') e^{-\kappa r}, & r > r'. \end{cases}$$

Интегральное уравнение, которому удовлетворяет  $R$ , имеет вид

$$R(r) = b^2 \int_0^\infty G_\kappa(r|r') u(r') R(r') dr'.$$

Мы можем рассматривать это уравнение как задачу о собственных значениях с собственным значением, равным  $b^2$ . Нужно напомнить, что  $b^2$  есть глубина потенциальной ямы, тогда как  $\kappa^2$  пропорционально энергии. Таким образом, определение  $b^2$ , которым мы теперь и займемся, соответствует нахождению интенсивности потенциала при данной форме его  $u$ , которая определит уровень с заданной энергией. Эта схема вполне соответствует положению в ядерной физике, когда энергия известна из эксперимента и желательно найти соответствующую потенциальную энергию. Конечно, если вычисление, определяющее  $b^2$ , может быть выполнено аналитически, то получаем соотношение между  $b^2$  и  $\kappa^2$ , из которого можно выразить  $\kappa^2$  через  $b^2$ .

Мы теперь можем изложить итерационную часть метода. Пусть  $R_0$  — начальное, предположительное значение  $R$ , которое может быть получено разными способами (например, вариационным методом, отправляясь от простой пробной функции). Тогда первая итерация  $R_1$  дается равенством

$$R_1(r) = \int_0^\infty G_\kappa(r|r') u(r') R_0(r') dr'$$

и вообще

$$R_n(r) = \int_0^\infty G_\kappa(r|r') u(r') R_{n-1}(r') dr'.$$

Заметим, что собственное значение  $b^2$  не должно входить в эти рекуррентные соотношения, так как здесь играет роль только форма волновых функций, а не их нормировка. Эти волновые функции  $R_n$  должны быть теперь подставлены в вариационные выражения (12.3.65), а также в выражение, которое может быть получено прямо из интегрального уравнения, определяющего  $R$  [см. уравнение (9.4.42)]. Здесь выражение  $J$ , подлежащее варьированию, имеет вид

$$J = \frac{\int_0^\infty [u(r) R^2(r)] dr}{\int_0^\infty \int_0^\infty [R(r) u(r) G_\kappa(r|r') u(r') R(r')] dr' dr}. \quad (12.3.65)$$

Приближения для собственного значения  $b^2$  будем обозначать через  $(b^2)^{(n)}$ , где  $n$  может быть либо целым, либо полужелым числом;  $(b^2)^{(0)}$  получается с помощью подстановки  $R_0/r$  в выражение вариационного принципа (12.3.64)<sup>1</sup>. Дальнейшие приближения даются равенствами:

$$\begin{aligned} (b^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)} &= \frac{(0, 0)}{(0, 1)}, \\ (b^2)^{(1)} &= \frac{(0, 1)}{(1, 1)}, \\ &\dots \dots \dots \\ (b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)} &= \frac{(n, n)}{(n, n+1)}, \\ (b^2)^{(n+1)} &= \frac{(n, n+1)}{(n+1, n+1)}, \end{aligned}$$

где элемент  $(p, q)$  определяется следующим образом:

$$(p, q) = \int_0^\infty R_p u R_q dr.$$

Можно показать (см. гл. 9, стр. 134), что

$$(b^2)^{(0)} \geq (b^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)} \geq (b^2)^{(1)} \geq \dots \geq (b^2)^{(n)} \geq (b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)} \geq b^2,$$

так что последовательные приближения для  $b^2$  образуют монотонную последовательность, приближающуюся к  $b^2$  сверху.

Из рассуждений гл. 9, стр. 139 мы можем получить также нижнюю границу для  $b^2$ :

$$b^2 \geq (b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)} \left[ 1 - \frac{(b^2)^{(n)} - (b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)}}{b_1^2 - (b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)}} \right].$$

Здесь  $b_1^2$  — второе собственное значение интегрального уравнения для  $R$ . Это соответствует глубине потенциала, для которой  $-x^2$  является не наименьшим, а вторым собственным значением. Нет необходимости точно знать  $b_1^2$ ; подстановка в предыдущее неравенство вместо  $b_1^2$  его нижней грани не нарушает неравенства.

Такая нижняя грань может быть получена из разложения [см. (9.4.113)]:

$$S = \int_0^\infty dr \int_0^\infty [u(r) G_x(r|r') G_x(r'|r) u(r')] dr' = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{b_n^4},$$

где  $b_0^2$  — первое собственное значение, рассмотренное выше,  $b_1^2$  — следующее

и т. д. Мы видим, что  $\frac{1}{b_1^4} = S - \frac{1}{b_0^4} - \sum_{n=2}^\infty \frac{1}{b_n^4}$ , или  $\frac{1}{b_1^4} < S - \frac{1}{b_0^4}$ ,

или 
$$\frac{1}{b_1^4} < \left\{ S - \left[ \frac{1}{(b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)}} \right]^2 \right\},$$

<sup>1</sup>) Выражение для  $(b^2)^{(0)}$  имеет вид  $(b^2)^{(0)} = \left\{ x^2 \int_0^\infty R_0^2 dr + \int_0^\infty \left( \frac{dR_0}{dr} \right)^2 dr \right\} / (0,0)$ .

так как  $(b^2)^{\left(n+\frac{1}{2}\right)} > b_0^2$ . Таким образом, мы имеем нижнюю грань для  $b_1^2$ , которая может быть получена с помощью непосредственного интегрирования выражения для  $S$  и применения приближенного значения  $b^2$  для наименьшего собственного значения. Подставляя выражение для  $G_x$ , данное выше, в равенство, определяющее  $S$ , получим

$$S = \frac{2}{\kappa^2} \int_0^{\infty} u(r) \operatorname{sh}^2(\kappa r) dr \int_r^{\infty} u(r') e^{-2\kappa r'} dr',$$

что может быть без труда вычислено для любой данной формы потенциала  $u(r)$ .

Как пример мы снова рассмотрим экспоненциальный потенциал  $u = e^{-\delta r}$ , воспользовавшись пробной функцией  $\varphi(\alpha, \beta; r)$ , определенной на стр. 645, и полагая, как и раньше,  $\alpha^2 = -\varepsilon = \kappa^2$ . Следовательно, эта функция при  $\beta = \sqrt{\frac{1}{2} \delta (\alpha + \delta)}$  и есть начальная функция  $R_0$ ; для получения итераций мы применяем  $G_x$ , где  $x$  заменено через  $\alpha$ . Таким образом,

$$R_1 = \frac{2}{\delta(\delta+2\alpha)} [e^{-\alpha r} - e^{-(\alpha+\delta)r}] - \frac{2}{(\delta+\beta)^2 - \alpha^2} [e^{-\alpha r} - e^{-(\beta+\delta)r}].$$

Отсюда можно определить  $(b^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)}$ :

$$(b^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)} d^2 = \frac{4[(\alpha+\beta)d+2][(\alpha+\beta)d+1][3d+1][\alpha d+1][2\alpha d+1]}{(2\beta d+1)[10\alpha^2 d^2 + 14\alpha d + 5 + (7\alpha d+5)(\beta-\alpha)d + (\beta-\alpha)^2 d^2]},$$

тогда как

$$S = \frac{d^4}{2(1+\alpha d)(1+2\alpha d)^2}.$$

Можно также определить  $(b^2)^{(1)}$ . При  $\alpha d = 0$ ,  $(b^2)^{(0)} d^2 = 1,4571$ ,  $(b^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)} d^2 = 1,4466$ . Точное значение равно четверти квадрата первого корня функции Бесселя, т. е. равно 1,4458. Мы видим, что в результате итерации ошибка уменьшилась с 2/3% до 1/20%. Значение  $(b^2)^{(1)}$  (которое может быть вычислено, так как  $R_1$  найдено) будет еще ближе к точному результату. Значение  $(b^2)^{\left(\frac{1}{2}\right)}$ , приведенное выше, является верхней гранью для  $b^2$ . Чтобы получить нижнюю грань, мы сначала заметим, что  $b_1^2 d^2 > 6,78$ , так что

$$b^2 d^2 > 1,4466 \left[ 1 - \frac{0,0105}{5,33} \right].$$

Следовательно,  $1,4466 > b^2 d^2 > 1,4437$ ; точное значение равно 1,4458. Мы видим, что точное значение  $(bd)^2$  определено с ошибкой, меньшей 0,3%. Как правило, нижняя грань не так близка к истинному значению  $(bd)^2$ , как верхняя.

Нет необходимости в том, чтобы отправляться от такой хорошей пробной начальной функции, как данная выше. Конечно, придется сделать больше итераций, чтобы достигнуть точности, полученной выше после одной итерации. Однако во многих случаях, в частности когда требуется численный результат, бывает выгоднее не производить сложные вариационные операции, а применить несколько раз процесс итерации.

Высшие связанные состояния (если они существуют) могут быть рассчитаны с помощью пробных функций, ортогональных к функции  $\varphi$ , полученной для наименьшего состояния. Например, приближенное наименьшее состояние с моментом количества движения, равным  $\hbar$ , может быть получено при помощи

$$\varphi(\gamma; r) = N \cos \vartheta r e^{-\gamma r}$$

или

$$\varphi(\alpha, \gamma; r) = N' \cos \vartheta (e^{-\alpha r} - e^{-\gamma r}),$$

где  $N$  и  $N'$  — нормирующие множители, такие, что  $\int \int \int \varphi^2 dv = 1$ .

**Вариационные принципы для задач рассеяния.** Рассеяние частиц силовым полем может быть также изучено вариационным методом. Здесь мы находим стационарные значения  $k \operatorname{ctg} \eta_l$  с фазовыми углами  $\eta_l$  (см. стр. 631) вместо того, чтобы разыскивать минимум энергии. Для различных форм вариационного принципа, рассмотренных ниже, характерно, что вид волновой функции важен только в той области, где силовое поле отлично от нуля.

Мы ограничимся рассмотрением медленных бомбардирующих частиц, когда только те функции, для которых  $l=0$ , сильно отличаются от соответствующих функций Бесселя, так что для расчета рассеяния требуется только фазовый угол  $\eta_0$  при  $l=0$ . Радиальное уравнение, которое требуется решить, имеет вид ( $\psi = R/r$ )

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + [k^2 - U(r)]R = 0, \quad k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2}, \quad U(r) = \frac{2MV(r)}{\hbar^2}.$$

Мы знаем, что при больших значениях  $r$   $R \simeq S \equiv C \sin(kr - \eta_0)/\sin \eta_0$  ( $C$  — произвольная постоянная), так что  $S$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 S}{dr^2} + k^2 S = 0.$$

Вариационные принципы выражаются через  $R$  и  $S$  или через  $S - R = \omega$ . Функция  $\omega$  заметно отличается от нуля только в области, где  $U \neq 0$ , как видно из уравнения, которому она удовлетворяет,

$$\frac{d^2 \omega}{dr^2} + [k^2 - U] \omega + US = 0.$$

Следуя результатам гл. 9, мы можем получить два вариационных принципа, совершенно аналогичных тому, который записан с помощью выражения (12.3.65). В первом требуется найти стационарное значение выражения

$$[K] = \int_0^\infty \left[ \left( \frac{dS}{dr} \right)^2 - \left( \frac{dR}{dr} \right)^2 - U(r) R^2 + k^2 (S^2 - R^2) \right] dr. \quad (12.3.66)$$

Если  $S$  нормировано так, что  $S(0) = 1$  (т. е.  $C = -1$ ), то  $K = [k \operatorname{ctg} \eta_0]$  (по поводу смысла скобок см. стр. 106).

Этот вариационный принцип может быть применен для установления зависимости  $k \operatorname{ctg} \eta_0$  от  $k^2$ . Пусть точное решение при  $k^2 = k_0^2$  равно  $R_0$ , а его соответствующее асимптотическое выражение равно  $S_0$ . Они могут быть подставлены как варьируемые волновые функции в (12.3.66). Тогда

$$\left[ \frac{d(k \operatorname{ctg} \eta_0)}{d(k^2)} \right]_{k=k_0} = \int_0^\infty (S_0^2 - R_0^2) dr,$$

что дает непосредственно производную выражения  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ , рассматриваемого как функция от  $k^2$ , т. е. от энергии, при  $k^2 = k_0^2$ .

Также ясно, что эта производная зависит только от поведения  $R_0$  в области, где  $U$  велико (где  $R_0$  не совпадает со своим асимптотическим значением  $S_0$ ). Если в этой области  $|U| \gg k^2$ , т. е. величина потенциальной энергии много больше чем  $k^2$ , изменение волновой функции при изменении  $k^2$  будет малым, и можно ожидать, что приведенное выше

выражение для производной будет точным для некоторого промежутка значений  $k_0$ . Или, другими словами, при малых значениях  $k^2$ , т. е. для частиц малых энергий, функция  $k \operatorname{ctg} \eta_0$  будет линейной функцией от  $k^2$ . Эта линейная зависимость сохраняет силу до тех пор, пока  $k^2 \ll |U|$ , т. е.  $E \ll |V|$ .

Так как данная выше производная не зависит от асимптотических значений  $R_0$ , которые компенсирует  $S_0$ , мы можем подставить очень грубое приближение для  $R_0$  и все же получить достаточно хорошие результаты. Например, в случае показательного потенциала, рассмотренного в предыдущем пункте, было найдено, что  $R_0 = e^{-\alpha r} - e^{-\beta r}$  и, следовательно<sup>1)</sup>,  $S_0 = e^{-\alpha r}$ ,  $\beta d = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \alpha d)}$ , было очень хорошей волновой функцией [еще лучшая дается выражением  $R_1$  на стр. 649)]. Если  $\hbar^2 \alpha^2 / 2M$  — энергия связи системы — много меньше чем  $V$ , то значение интеграла для  $d(k \operatorname{ctg} \eta_0) / d(k^2)$  не слишком меняется при переходе от энергии  $-\hbar^2 \alpha^2 / 2M$  к энергии  $+E$ , так что мы можем подставить эту волновую функцию вместо  $R_0$  в интеграл, даже несмотря на то, что ее поведение при  $r \rightarrow \infty$  далеко от правильного. Тогда

$$\frac{d(k \operatorname{ctg} \eta_0)}{d(k^2)} \simeq d \left[ \frac{3\beta d - \alpha d}{2\beta d(\alpha d + \beta d)} \right].$$

Однако нам требуется знать больше, чем только значение производной, нам нужно знать значение самой функции при  $k = k_0$ . Для нахождения его мы можем подставить в (12.3.66) пробную функцию  $R$  с одним или несколькими параметрами и соответствующее  $S$  и варьировать параметры, чтобы определить лучшее возможное  $u$  и соответствующее  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ . Однако вариационный принцип (12.3.66) не является наиболее удобным для этой цели, так как  $S$  явно зависит от неизвестного сдвига фаз  $\eta$ . Если мы требуем, чтобы  $\eta$  было выбрано как точный сдвиг фаз, и не хотим его истолковывать как параметр, подлежащий варьированию, то применяем второй вариационный принцип [см. уравнение (9.4.57)], в котором не участвует  $S$ . Выражение, подлежащее варьированию с целью получения стационарного значения, имеет вид

$$L = \frac{B + \sqrt{B^2 - 4AC}}{2A},$$

где

$$A = \int_0^\infty \frac{U \sin^2(kr)}{k^2} dr,$$

$$B = 1 + \int_0^\infty \frac{U \sin(2kr)}{k} dr - 2 \int_0^\infty \frac{U \sin(kr)}{k} \omega dr,$$

$$C = \int_0^\infty \left[ \left( \frac{d\omega}{dr} \right)^2 - (k^2 - U)\omega^2 \right] dr - 2 \int_0^\infty U \omega \cos(kr) dr + \int_0^\infty U \cos^2(kr) dr,$$

где по-прежнему  $\omega = S - R$ . Если положить  $\omega(0)$  равным 1, то  $L$  для точного выражения  $\omega$  дает как раз  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ . Мы снова подчеркнем тот факт, что  $\omega$ , будучи разностью между  $R$  и его асимптотическим выражением  $S$ , будет отличаться от нуля только в области, где  $U$  не слишком мало по сравнению с  $k^2$ .

Из этого вариационного принципа может быть получено приближение Борна (12.3.63), если взять  $\omega = \cos(kr)$  в качестве пробной функции. Этот выбор соответствует предположению, что  $R$  пропорционально  $\sin(kr)$ , что

<sup>1)</sup> Предполагается, что  $\beta > \alpha$  (см. стр. 645, 646). — *Прим. ред.*

дает неискаженную падающую плоскую волну. Тогда  $C=0$ ,  $B=1$  и  $L=1/A$  или

$$\operatorname{tg} \eta_0 \simeq \frac{1}{k} \int_0^{\infty} U \sin^2(kr) dr,$$

что при малом  $\eta_0$  является приближением Борна.

Вторым употребительным видом приближенного выражения для  $R$  является тот, который мы применяли при вычислении производной. Снова мы говорим, что при  $U \gg k^2$  изменение энергии от  $+\hbar^2 k^2/2M$  до  $-\hbar^2 k^2/2M$  сильно не отражается на изменении  $\omega$ , так что мы можем в  $L$  положить  $\omega = e^{-\beta r}$  и таким образом получить постоянное значение  $[k \operatorname{ctg} \eta_0]$ ; производная как функция от  $k^2$  была рассмотрена раньше. Так как мы имеем дело с малыми значениями  $k$ , мы положим  $k=0$  и найдем  $k \operatorname{ctg} \eta_0$  для этого значения.  $A$ ,  $B$  и  $B^2 - 4AC$  будут иметь значения:

$$\begin{aligned} A &= -2b^2 d^3, \\ B &= 1 - \frac{2(b^2 d^2)(\beta d)(2+\beta d)}{(\beta d+1)^2}, \\ B^2 - 4AC &= 1 + 4b^2 d^2(\beta d) - \frac{8(b^4 d^4)(\beta^4 d^4)(2+\beta d)}{(1+\beta d)^4(1+2\beta d)}. \end{aligned}$$

Мы можем, если пожелаем, исключить  $b^2 d^2$ , воспользовавшись результатом, полученным на стр. 646 для  $(2bd)^2$ , который может быть представлен в виде

$$(2bd)^2 = (2\beta d - 1)(2\beta d + 1)^3,$$

так что окончательное выражение для  $k \operatorname{ctg} \eta_0$  при  $k=0$  зависит только от комбинации  $\beta d$  (и, следовательно, от  $\alpha d$ ), если пренебречь множителем пропорциональности для  $d$ .

Если значение энергии лежит между областями применимости приближения Борна и приближения, приведенного выше (которое может быть названо приближением сильного поля), то нужно практически проделать все вычисления, связанные с процессом варьирования. В случае медленных бомбардирующих частиц употребительной пробной функцией является  $\omega = e^{-\gamma r}$ , где  $\gamma$  — параметр варьирования.

**Вариационно-итерационный метод для задач рассеяния.** Как и в случае связанных состояний, мы можем для решения задач рассеяния составить интегральное уравнение. К интегральному уравнению может быть применен метод итераций; оно допускает также применение вариационного принципа для  $k \operatorname{ctg} \eta_l$ .

Мы снова ограничиваемся случаем  $l=0$ . Интегральное уравнение, записанное в форме, наиболее удобной для итераций, имеет вид

$$R = \int_0^{\infty} \Gamma_k(r|r_0) U(r_0) R(r_0) dr_0,$$

где

$$\begin{aligned} \Gamma_k(r|r_0) &= k \operatorname{ctg} \eta_0 \frac{\sin(kr) \sin(kr_0)}{k^2} - \frac{1}{k} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \sin(kr) \cos(kr_0), \quad r < r_0, \\ \cos(kr) \sin(kr_0), \quad r > r_0, \end{array} \right\} = \\ &= k \operatorname{ctg} \eta_0 \frac{\sin(kr) \sin(kr_0)}{k^2} + G_k(r|r_0). \end{aligned}$$

Схема итераций дается рекуррентным соотношением между  $n$ -й и  $(n+1)$ -й итерациями

$$R_{n+1} = \int_0^{\infty} \Gamma_k(r|r_0) U(r_0) R_n(r_0) dr_0.$$

Вычисление  $R_{n+1}$  требует подстановки приближенного значения  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ , которое может быть получено с помощью вариационного принципа, указанного ниже; наилучшее возможное при данной форме  $R$  решение получается при стационарном значении  $J$  — выражения, подлежащего варьированию. Если мы в выражение  $J$  подставим точные волновые функции, оно сделается равным  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ , так что мы имеем дело с вариационным принципом для  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ .  $[J]$  равно

$$[J] = \frac{\int_0^{\infty} R^2 U dr - \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} R(r) U(r) G_k(r|r_0) U(r_0) R(r_0) dr dr_0}{\left[ \frac{1}{k} \int_0^{\infty} UR \sin(kr) dr \right]^2}. \quad (12.3.67)$$

Итерационная схема комбинируется с вариационным принципом посредством подстановки  $R_n$  в выражение (12.3.67), что дает  $n$ -е приближение для  $k \operatorname{ctg} \eta_0$ , которое мы обозначим через  $J^{(n)}$

$$J^{(n)} = J^{(n-1)} + \frac{\int_0^{\infty} R_n U [R_n - R_{n+1}] dr}{\left[ \frac{1}{k} \int_0^{\infty} UR_n \sin(kr) dr \right]^2}.$$

Нужно отметить, что теория сходимости процесса итерации для задач этого типа не разработана так полно, как в случае процессов итерации для задачи связанного состояния, рассмотренной раньше. Удачные применения этой схемы, данной Швингером, можно найти в литературе, причем оказывается, что метод дает прекрасные результаты в случаях, когда  $U \gg k^2$ , т. е. при малых энергиях, единственных случаях, в которых метод широко применялся.

В заключение заметим, что введя в выражение (12.3.67) пробную функцию  $R = \sin(kr)$ , получим несколько улучшенное приближение Борна

$$k \operatorname{ctg} \eta_0 \simeq k \operatorname{ctg} \eta_0^{(B)} - \operatorname{ctg}^2 \eta_0^{(B)} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \sin(kr) U(r) G_k(r|r_0) U(r_0) \sin(kr_0) dr dr_0$$

или

$$k \operatorname{ctg} \eta_0 \simeq k \operatorname{ctg} \eta_0^{(B)} + 2 \frac{\operatorname{ctg}^2 \eta_0^{(B)}}{k} \int_0^{\infty} U \sin^2(kr) dr \int_r^{\infty} U \sin(kr_0) \cos(kr_0) dr_0,$$

где  $\eta_0^{(B)}$  — борновское приближение для фазового сдвига, данное в равенстве (12.3.63).

**Вариационный принцип для амплитуды рассеяния.** С помощью трехмерной функции Грина может быть получен вариационный принцип, аналогичный выведенному из (11.4.57), в применении к амплитуде рассеяния  $f(\vartheta)$  дающий то же самое, что и выражение (12.3.67) дает для фазовых углов. Мы преобразуем уравнение Шредингера

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = U(r) \psi, \quad k^2 = \frac{2ME}{\hbar^2}, \quad U = \frac{2MV}{\hbar^2},$$



в интегральное уравнение для  $\psi$

$$\psi(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{k}R}}{R} U(r_0) \psi(\mathbf{r}_0) dv_0,$$

где  $\mathbf{k}_i$  — вектор длины  $k$ , проведенный в направлении падающего пучка частиц. Асимптотическое поведение  $\psi$  тогда имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) \simeq C e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + C f(\vartheta) \frac{e^{i\mathbf{k}r}}{r}, \quad r \rightarrow \infty,$$

$$f(\vartheta) = -\frac{1}{4\pi C} \int e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} U(r_0) \psi(\mathbf{r}_0) dv_0,$$

где  $f(\vartheta)$  — амплитуда рассеяния,  $|f(\vartheta)|^2$  — дифференциальное эффективное сечение (см. стр. 65), его интеграл по всем направлениям есть полное эффективное сечение  $Q$  для упругого рассеяния, вызванного потенциальным полем  $V(r)$ . Мы умножили и разделили на  $C$  — амплитуду падающего пучка — для того, чтобы наши результаты отнести к единице интенсивности падающего пучка.

Вектор  $\mathbf{k}_s$  имеет длину  $k$  и направлен к наблюдателю, образуя угол  $\vartheta$  с вектором  $\mathbf{k}_i$ . Подставим теперь в интегральное уравнение вместо  $C$  его выражение через  $f(\vartheta)$ , что позволит сделать уравнение однородным:

$$\psi(\mathbf{r}) = -\frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{4\pi f(\vartheta)} \int e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} U(r_0) \psi(\mathbf{r}_0) dv_0 - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{k}R}}{R} U(r_0) \psi(\mathbf{r}_0) dv_0.$$

Чтобы получить вариационный принцип для  $f(\vartheta)$ , мы поступаем так, как было указано в параграфах 9.4 и 11.4, т. е. умножаем на  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}) U(r)$ , где  $\tilde{\psi}$  — решение для падающей волны, распространяющейся в направлении  $-\mathbf{k}_s$  и рассеиваемой в направлении  $-\mathbf{k}_i$  (сопряженный случай, где источник и наблюдатель поменялись местами), и интегрируем по  $dv$ . Окончательное выражение для вариационного принципа имеет вид

$$[f(\vartheta)] = \frac{-\int e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} U(r) \tilde{\psi}(\mathbf{r}) dv \int e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0} U(r_0) \psi(\mathbf{r}_0) dv_0}{4\pi \int \tilde{\psi}(\mathbf{r}) U(r) \psi(\mathbf{r}) dv + \iint \tilde{\psi}(\mathbf{r}) U(r) (e^{i\mathbf{k}R}/R) U(r_0) \psi(\mathbf{r}_0) dv dv_0}. \quad (12.3.68)$$

Величина  $[f]$  становится стационарной, если использованы точные выражения для  $\psi$  и  $\tilde{\psi}$ , и тогда  $[f(\vartheta)]$  равно  $f(\vartheta)$ ; значения параметров в выбранной нами форме функции  $\psi$  (и соответственно  $\tilde{\psi}$ ), дающие минимум для  $J$ , соответствуют наилучшему выбору  $\psi$  и  $\tilde{\psi}$  среди всех выражений выбранного типа, а соответствующее минимальное значение  $[f]$  является наилучшим выражением для  $f(\vartheta)$ , возможным при использованных видах функций  $\psi$  и  $\tilde{\psi}$ . Найденный «наилучший вид» функции  $\psi$  может быть подставлен в правую часть интегрального уравнения для  $\psi$  с тем, чтобы с помощью последовательных итераций найти еще лучший вид, подстановка которого в (12.3.68) позволит улучшить выражение для  $f$ . Связь между этой процедурой и процедурой, рассмотренной в предыдущем пункте, очевидна; формулировка здесь в принципе проще, однако осуществление ее обычно более трудно, так как здесь мы имеем дело с трехмерными интегралами вместо одномерных.

Если выбранной для  $\psi$  формой является плоская волна (что дает неплохое приближение при больших значениях  $k$ ), полученное выражение для  $[f]$  тесно связано с приближением Борна для упругого рассеяния, данным в равенствах (12.3.58) и (12.3.59). Трехмерное преобразование Фурье потенциальной функции имеет вид

$$u(\mathbf{K}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} U(r) dv,$$

а преобразование Фурье функции Грина  $e^{ihR}/4\pi R$  имеет вид

$$g_k(\mathbf{K} | \mathbf{r}_0) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{e^{ihR}}{4\pi R} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} dV = (2\pi)^{-3/2} \frac{e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_0}}{K^2 - k^2}$$

[см. (11.3.6)]. Если теперь мы подставим в (12.3.68) пробные функции  $\phi \simeq e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}$  и  $\tilde{\phi} \simeq e^{-i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}}$  и воспользуемся теоремой о свертке (4.8.25) в двойном интеграле, то окончательно получим

$$f(\vartheta) \simeq - \sqrt{\frac{1}{2} \pi} \frac{[u(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s)]^2}{u(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) + \frac{1}{\sqrt{8\pi^3}} \int \frac{u(\mathbf{k}_i - \mathbf{K}) u(\mathbf{K} - \mathbf{k}_s)}{K^2 - k^2} dV_{\mathbf{K}}},$$

где интегрирование распространено на весь трехмерный объем « $K$ -пространства».

Если пренебречь интегралом, получим приближение Борна

$$f_B(\vartheta) = - \sqrt{\frac{1}{2} \pi} u(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) = - \frac{1}{4\pi} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \cdot \mathbf{r}} U(r) dV.$$

Приближения Борна высших порядков (см. § 9.3) получаются, если разложить знаменатель в выражении (12.3.68) и воспользоваться итерациями для последовательного получения лучших приближений для  $\phi$ . Однако легко видеть, что в случае, когда вышеприведенный интеграл по  $K$ -пространству не является малым сравнительно с  $u(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s)$ , ряд Борна не будет очень хорошо сходиться и в этом случае будет целесообразнее использовать данную выше формулу, не разлагая знаменатель.

Чтобы видеть, как протекают вычисления, рассмотрим потенциал  $U(r) = -\gamma e^{-\lambda r}/r$  или  $V(r) = -\eta^2 e^{-\lambda r}/r$  ( $\eta^2 = \hbar^2 \gamma / 2M$ ), мало отличающийся от кулоновского вблизи центра сил, но убывающий значительно быстрее кулоновского потенциала при больших значениях  $r$ . Если бы этот потенциал относился к электрону с зарядом  $-e$ , он соответствовал бы полю точечного заряда  $\eta^2/e$ , помещенного в точке  $r=0$  и окруженного распределением зарядов с плотностью  $-\eta^2 \lambda^2 e^{-\lambda r} / 4\pi e r$  и с общим зарядом  $-\eta^2/e$ , которое полностью уничтожает влияние центрального заряда при больших значениях  $r$  (этот потенциал предложил Юкава в качестве возможного потенциала взаимодействия нуклонов). Преобразование Фурье этого потенциала имеет вид

$$u(\mathbf{K}) = \frac{-\gamma}{\sqrt{\frac{\pi}{2} (K^2 + \lambda^2)}},$$

так что приближение Борна дает выражение

$$f(\vartheta) \simeq f_B(\vartheta) = \frac{\gamma}{|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s|^2 + \lambda^2} = \frac{2M\eta^2}{\hbar^2 \left[ \lambda^2 + 4k^2 \sin^2 \left( \frac{\vartheta}{2} \right) \right]},$$

которое следует сравнить с формулой Резерфорда на стр. 620 ( $k = Mv/\hbar$ ,  $\eta^2 = Ze^2$ ).

Интегральная свертка, соответствующая двойному интегралу в знаменателе (12.3.68), может быть вычислена методом, изложенным в § 9.3 [см. (9.3.55)]:

$$\frac{\gamma^2}{\sqrt{2\pi^5}} \int \frac{dV_{\mathbf{K}}}{(K^2 - k^2) [|\mathbf{K} - \mathbf{k}_i|^2 + \lambda^2] [|\mathbf{K} - \mathbf{k}_s|^2 + \lambda^2]} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \gamma^2 H(\vartheta),$$

$$\begin{aligned}
 H(\vartheta) = & \frac{1}{2k \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \sqrt{\lambda^4 + 4k^2 \left[\lambda^2 + k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)\right]}} \times \\
 & \times \left\{ \operatorname{arctg} \frac{\lambda k \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)}{\sqrt{\lambda^4 + 4k^2 \left[\lambda^2 + k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)\right]}} + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} i \ln \frac{\sqrt{\lambda^4 + 4k^2 \left[\lambda^2 + k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)\right]} + 2k^2 \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)}{\sqrt{\lambda^4 + 4k^2 \left[\lambda^2 + k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)\right]} - 2k^2 \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right)} \right\}.
 \end{aligned}$$

Мнимая часть  $H$  получается вследствие того, что мы должны идти вокруг полюсов подинтегральной функции при  $K = \pm k$  выше полюса в точке  $-k$  и ниже полюса в точке  $+k$ , что соответствует требованию, чтобы преобразование Фурье функции  $e^{i\mathbf{k}R}/4\pi R$  изображало расходящуюся волну [см. анализ уравнения (7.2.31)]. Выражение для амплитуды рассеяния  $f(\vartheta)$  в предположении, что пробные функции для  $\psi$  и  $\tilde{\psi}$  в (12.3.68) соответствуют плоским волнам, имеет тогда вид

$$\begin{aligned}
 f(\vartheta) \simeq & \frac{\left\{ \gamma / \left[ \lambda^2 + 4k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right] \right\}^2}{\left\{ \gamma / \left[ \lambda^2 + 4k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right] \right\} - \gamma^2 H(\vartheta)} = \\
 & = f_B(\vartheta) \left\{ \frac{1}{1 - \gamma \left[ \lambda^2 + 4k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right] H(\vartheta)} \right\},
 \end{aligned}$$

что отличается от приближения Борна  $f_B$  множителем, стоящим в скобках. Если  $\gamma$  мало, этот множитель вносит лишь малую поправку; если  $\gamma$  велико, изменение может быть заметным. Вообще измененная амплитуда рассеяния ближе подходит к точному решению, чем простое приближение Борна.

Предельные значения поправочного члена для малых значений переменных имеют вид

$$\left[ \lambda^2 + 4k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right] H(\vartheta) \simeq \begin{cases} \frac{\lambda}{2k^2} + \frac{i}{k} \ln \left[ \frac{2k}{\lambda} \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right], & \lambda \ll k, \\ \frac{1}{2(\lambda - 2ik)}, & \lambda \gg k \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta\right), \end{cases}$$

что приводит к нескольким интересным следствиям. Прежде всего отметим, что в пределе при  $\lambda \rightarrow 0$  приближение Борна  $f_B \simeq \left[ \lambda / 4k^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\vartheta\right) \right]$  является точным, поскольку речь идет о модуле  $f$  [см., например, (12.3.43)]. В этом предельном случае поправочный множитель в фигурных скобках будет мнимым; в самом деле он связан со вторым членом разложения экспоненты с  $i$  в показателе, содержащейся в точном выражении для  $f$ , приведенном в равенстве (12.3.43). Здесь поправочный член  $H$  изменяет только фазу  $f$  настолько, насколько это вообще может сделать аддитивный поправочный член, но не модуль функции  $f$ .

Можно было бы попытаться рассчитать полное эффективное сечение, соответствующее  $f$ , с помощью равенства (12.3.56'). Это равенство справедливо для точного решения, но полностью непригодно для приближения Борна, так как  $f_B$  действительно. Тем не менее в настоящем случае можно проинтегрировать  $|f_B|^2$  по всем углам рассеяния, чтобы полу-

чить «борновское поперечное сечение»

$$Q_B = 2\pi \int_0^\pi |f_B|^2 \sin \vartheta \, d\vartheta = \frac{4\pi\gamma^2}{\lambda^2(\lambda^2 + 4k^2)}.$$

Здесь, однако, мнимая часть  $H$  не равна нулю, так что в следующих приближениях применение (12.3.56') приводит к результату, отличному от нуля:

$$Q = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} [f(0)] \simeq \frac{4\pi}{k} f_B(0) \operatorname{Im} \frac{1}{1 - \gamma^2 H_r(0)} = \frac{4\pi\gamma^2}{\lambda^2 \left[ \left( \lambda - \frac{\gamma}{2} \right)^2 + 4k^2 \right]},$$

который достаточно близок к борновскому поперечному сечению, особенно, если  $\gamma$  меньше чем  $\lambda$ . Таким образом, действительно, выражение второго порядка для  $f(\vartheta)$  может быть использовано для получения выражения первого порядка для  $Q$ , что согласуется с рассуждением на стр. 73. Выражение второго порядка для  $Q$  может быть получено с помощью интегрирования по всем углам выражения  $f(\vartheta)$  предыдущей страницы, содержащего поправку с  $H$  (однако это интегрирование нелегко выполнить).

Возвращаясь к первоначальному интегральному уравнению для  $\psi$ , мы можем теперь с помощью итераций получить уточненное выражение  $\psi$ :

$$\psi^{(2)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int \frac{e^{i\mathbf{k}R - \lambda r_0}}{4\pi R r_0} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0} d\nu_0 = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \frac{\gamma}{2\pi^2} \int \frac{e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d\nu_K}{(K^2 - \lambda^2) [|\mathbf{K} - \mathbf{k}_i|^2 + \lambda^2]}.$$

Каждое из этих выражений может быть вычислено с помощью разложения по сферическим гармоникам.

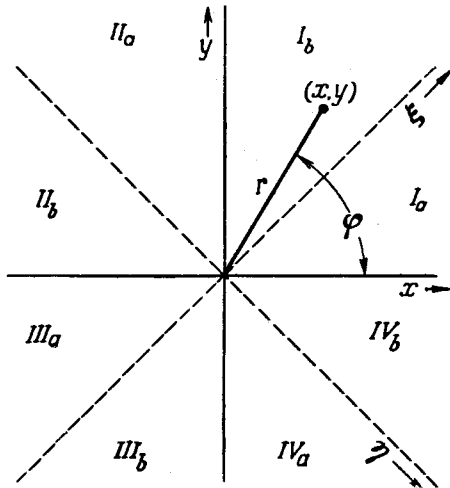
**Две частицы, одномерный случай.** Задача о взаимодействии двух одинаковых частиц с фиксированным потенциальным полем, а также между самими частицами в основном эквивалентна классической задаче трех тел. Фиксированное потенциальное поле, действующее одинаково на обе частицы, можно рассматривать как поле третьего тела, настолько тяжелого, что центр тяжести системы совпадает с его положением (в начале координат). Классическая задача трех тел не разрешима по существу, частично из-за возможных столкновений частиц. Задача квантовой механики также по существу не разрешима и в значительной степени по тем же причинам.

Чтобы видеть возникающие здесь трудности и желая избежать излишних математических осложнений, мы рассмотрим чрезвычайно простой случай двух одномерных частиц, находящихся под действием очень простого потенциального поля. Смещение частицы 1 относительно центра силового поля обозначим через  $x$ , а смещение частицы 2 — через  $y$ . В начале предположим, что потенциальное поле, действующее на каждую частицу, представляет собой очень глубокую и очень узкую потенциальную яму в начале координат — дельта-функцию, подобную рассмотренной на стр. 595. В этом случае поле действует на каждую частицу, так что уравнение для общей волновой функции двух частиц для стационарного состояния с энергией  $\hbar^2 \varepsilon / 2M$ , если пренебречь полем, действующим между частицами, имеет вид

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \varepsilon + 2a\delta(x) + 2a\delta(y) \right] \psi = 0.$$

Постоянная  $M$  есть масса каждой частицы, а постоянная  $a = MV_0/\hbar^2$  — параметр потенциальной функции,  $V_0$  — «интенсивность» ямы, описываемой дельта-функцией.

Наиболее важный факт, на который указывает это уравнение, состоит в том, что волновая функция для системы двух частиц зависит от двух переменных и что уравнение и система могут быть изображены нагляднее в плоскости, как показывает рис. 12.7. Потенциальный центр порождает глубокие, узкие долины, расположенные вдоль осей  $x$  и  $y$ ; в других точках потенциал равен нулю. С другой стороны, это уравнение показывает, что  $\psi$  является решением двумерного уравнения Гельмгольца при  $\epsilon = k^2$  всюду, кроме точек, расположенных на осях координат. Вдоль  $x=0$  и  $y=0$  находятся полуотражающие зеркала, вызывающие разрывы в наклоне волны, причем разрыв, нормальный к зеркалу, равен произведению  $-2a$  на величину волны у зеркала. Если две частицы свободны и обе начинают движение от  $+\infty$  соответственно со скоростями  $v_1$  и  $v_2$ , то волновая функция будет состоять из падающей плоской волны



падающей плоской волны

$$\psi_i = e^{-ik_1x - ik_2y}, \quad k_1 = \frac{Mv_1}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{Mv_2}{\hbar},$$

Рис. 12.7. Координаты и обозначения квадрантов для системы двух одномерных частиц.

сложенной со всеми отражениями этой волны от «зеркал», расположенных вдоль осей  $x$  и  $y$ .

Отражения изменяются с изменением угла падения; например, для волны  $\psi_i$ , ударяющейся о зеркало  $x=0$ , падающая, отраженная и прошедшая сквозь зеркало волны имеют вид

$$\psi = \begin{cases} e^{-ik(x \cos u + y \sin u)} - \frac{a}{a + ik \cos u} e^{ik(x \cos u - y \sin u)}, & x > 0, \\ \frac{ik \cos u}{a + ik \cos u} e^{-ik(x \cos u + y \sin u)}, & x < 0, \end{cases}$$

где  $k^2 = k_1^2 + k_2^2 = \epsilon$ ,  $k_1 = k \cos u$ ,  $k_2 = k \sin u$ . Падающая волна образует с осью  $y$  угол падения  $u = \arctg(k_2/k_1)$ . Амплитуды отраженной и прошедшей через зеркало волн зависят от этого угла падения. Падающая волна  $\psi_i$  отражается от обоих зеркал, и волна, получившаяся в результате объединения отраженной, прошедшей через зеркало и падающей волн, принимает вид (для каждого из квадрантов, указанных на рис. 12.7)

$$\psi = \begin{cases} e^{-ikr \cos(\varphi - u)} + \frac{a^2 e^{ikr \cos(\varphi - u)}}{(a + ik \cos u)(a + ik \sin u)} - \frac{a e^{ikr \cos(\varphi + u)}}{(a + ik \cos u)} - \frac{a e^{-ikr \cos(\varphi + u)}}{a + ik \sin u}, & \text{I квадрант;} \\ \frac{ik \cos u e^{-ikr \cos(\varphi - u)}}{(a + ik \cos u)} - \frac{iak \cos u e^{-ikr \cos(\varphi + u)}}{(a + ik \cos u)(a + ik \sin u)}, & \text{II квадрант;} \\ \frac{-k^2 \sin u \cos u e^{-ikr \cos(\varphi - u)}}{(a + ik \cos u)(a + ik \sin u)}, & \text{III квадрант;} \\ \frac{ik \sin u e^{-ikr \cos(\varphi - u)}}{(a + ik \sin u)} - \frac{iak \sin u e^{ikr \cos(\varphi + u)}}{(a + ik \cos u)(a + ik \sin u)}, & \text{IV квадрант;} \end{cases} \quad (12.3.69)$$

здесь  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  и  $\varphi = \arctg(y/x)$  — полярные координаты в плоскости  $x, y$ . Две частицы, приходящие справа, частично отражаются потенциальными долинами, а частично проходят через них. Каждая частица сохраняет свою

кинетическую энергию, но имеет возможность изменить направление своего движения на противоположное. Относительные интенсивности отраженного и прошедшего пучков даются квадратами величин коэффициентов.

**Функция Грина.** Функция Грина для этой системы может быть получена из (11.2.22). Умножим  $\phi$  на  $e^{ik(x_0 \cos u + y_0 \sin u)}$  и проинтегрируем по  $u$  от  $-i\infty$  до  $+i\infty$ . Так как условия сопряжения (являющиеся однородными) удовлетворяются для каждого значения  $u$ , то весь интеграл также будет удовлетворять этим условиям. Первый член в I квадранте будет равен  $\pi i H_0^{(1)}(kR)$ , где  $R^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$ ; он определяет волну, излучаемую точечным источником, находящимся в точке  $(x_0, y_0)$  первого квадранта. Третий член соответствует волне, которая кажется приходящей из зеркально отраженной точки  $(-x_0, y_0)$ ; она не является симметричной, так как содержит в себе все функции Ганкеля высших порядков. С помощью производящей функции для тригонометрических функций, данной в таблице в конце гл. 10, мы можем получить разложение

$$\frac{a}{a + ik \cos u} = \frac{a}{\sqrt{a^2 + k^2}} \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n i^{-n} \left[ \frac{\sqrt{a^2 + k^2} - a}{k} \right]^n \cos(nu),$$

и, следовательно, третий член в выражении для первого квадранта принимает вид

$$-\frac{\pi i a}{\sqrt{a^2 + k^2}} \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon_m \left[ \frac{\sqrt{a^2 + k^2} - a}{k} \right]^m H_m^{(1)}(kR_2) \cos(m\varphi_2),$$

$$x + x_0 = R_2 \cos \varphi_2, \quad y - y_0 = R_2 \sin \varphi_2,$$

и определяет волну, отраженную от «зеркала»  $x = 0$ , которая кажется приходящей из изображения точки во втором квадранте; эта волна содержит угловые зависимости, необходимые для того, чтобы можно было удовлетворить условиям сопряжения при  $x = 0$  и  $y = 0$ . Все другие интегралы подобным же образом могут быть разложены на зависящие от угла волны, исходящие из источника или из одного из трех его изображений. Количество необходимых членов зависит от квадранта, в котором определяется  $\phi$ ; например, в III квадранте нужна только волна, исходящая из самого источника  $(x_0, y_0)$ , но ее угловая зависимость не является равномерной; она искажается благодаря прохождению через «зеркала».

Функция Грина символически изображена на рис. 12.8. Здесь представлена симметричная волна, выходящая из источника  $(x_0, y_0)$  (волновые фронты изображены сплошными линиями), а также отраженные волны и волны, прошедшие через зеркала, амплитуды которых зависят от угла (вол-

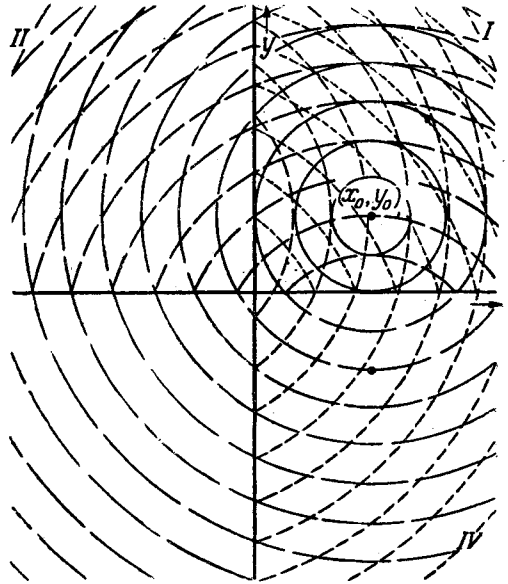


Рис. 12.8. набросок волновых фронтов для функции Грина при источнике в  $(x_0, y_0)$ . Волновые фронты, изображенные в I квадранте сплошными линиями, имеют одинаковую амплитуду. Амплитуды волновых фронтов, изображенных пунктиром, меняются с изменением угла.

новые фронты изображены пунктирными линиями). Выражение, описанное здесь и полученное интегрированием равенства (12.3.69) по  $u$ , пригодно почти всюду в плоскости  $x, y$ . Например, если источник  $(x_0, y_0)$  находится в другом квадранте, мы просто поворачиваем чертеж и заново перенумеровываем квадранты. Однако введенное нами выражение не будет пригодным, когда источник лежит точно на оси  $x$  или на оси  $y$ . На первый взгляд кажется, что из соображений симметрии должна существовать симметричная волна, выходящая из источника [в точке  $(x_0, 0)$ , например], и отраженная волна, идущая из его изображения  $(-x_0, 0)$ . Но такая волна не удовлетворяет требованию разрыва наклона на оси  $x$ ; она *слишком* симметрична.

Мы при этом забываем, что наша задача, если ее рассматривать с точки зрения отражения волны, является одной из задач, в которых возникают поверхностные волны; если эту задачу рассматривать с точки зрения частиц, она имеет связанные состояния. Для того чтобы увидеть, что здесь происходит, нужно рассмотреть эти поверхностные волны.

Только связанные состояния системы (без учета взаимодействия частиц) могут быть легко выражены через простые показательные функции, как это было сделано для уравнения (12.3.8). Имеем

$$\psi = \begin{cases} Ne^{-ax-ay} = Ne^{-a\xi}, & \text{I квадрант;} \\ Ne^{ax-ay} = Ne^{a\eta}, & \text{II квадрант;} \\ Ne^{ax+ay} = Ne^{a\xi}, & \text{III квадрант;} \\ Ne^{-ax+ay} = Ne^{-a\eta}, & \text{IV квадрант;} \end{cases} \quad (12.3.70)$$

здесь  $x = (1/\sqrt{2})(\xi + \eta)$ ,  $y = (1/\sqrt{2})(\xi - \eta)$  и  $\alpha = \sqrt{2}a$ . Волновая функция напоминает «крышу пагоды», достигая высшей точки при  $r = 0$  и опускаясь вниз по всем направлениям, причем склон становится все более пологим при больших  $r$ . Горизонталями<sup>1)</sup> для  $\psi$  (можно продолжить сравнение и назвать их «линиями черепицы») являются квадраты со сторонами, параллельными осям  $\xi$  и  $\eta$ ; крыша имеет гребни вдоль осей  $x$  и  $y$ , где расположены потенциальные долины. Допустимая энергия системы, очевидно, равна

$$E = -\frac{MV_0^2}{\hbar^2}, \quad \varepsilon = -2a^2.$$

Кстати, волновая функция этого связанного состояния, если перейти к полярным координатам  $r$  и  $\varphi$ , может быть выражена через полуцилиндрические функции, определенные в таблице в конце этой главы. Мы видим, что ряд

$$\psi = \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon_m (-1)^m \cos(4m\varphi) J_{4m}^{(4)}(i\sqrt{2}ar) \quad (12.3.71)$$

выражает  $\psi$  для всех значений  $\varphi$  от 0 до  $2\pi$  и что здесь приняты во внимание разрывы градиента  $\psi$  при  $\varphi = 0, \pi/2, \pi$  и  $3\pi/2$ . В самом деле, пользуясь свойствами функций  $J_{4m}^{(4)}(z)$ , мы можем показать непосредственно, что

$$\begin{aligned} \nabla^2\psi &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = \\ &= -\frac{4a}{\pi r} e^{-ar} \sum_m \varepsilon_m \cos(4m\varphi) + 2a^2\psi = \\ &= -\frac{2a}{r} \left[ \delta(\varphi) + \delta\left(\varphi - \frac{1}{2}\pi\right) + \delta(\varphi - \pi) + \delta\left(\varphi - \frac{3}{2}\pi\right) \right] \psi + 2a^2\psi = \\ &= -2a \left[ \delta(x) + \delta(y) \right] \psi + 2a^2\psi, \end{aligned}$$

<sup>1)</sup> То есть линиями  $\psi = \text{const.}$  — Прим. ред.

и, таким образом, доказать, что ряд (12.3.71) является решением уравнения с потенциалами в виде дельта-функции.

**Поверхностные волны.** Имеются также состояния, частично связанные и частично свободные, как, например, в случае, когда частица 2 находится в связанном состоянии, а частица 1 движется справа со скоростью  $v_1$ . Волновая функция тогда имеет вид

$$\psi = \begin{cases} e^{-a|y| - ik_a x} + \frac{a}{a + ik_a} e^{-a|y| + ik_a x}, & x > 0, \\ \frac{ik_a}{a + ik_a} e^{-a|y| - ik_a x}, & x < 0, \end{cases} \quad (12.3.72)$$

где  $k_a = Mv_1/\hbar$  и  $\varepsilon = k_a^2 - a^2$ . Хотя частица 1 может отразиться от долины при  $x=0$ , но при отсутствии взаимодействия между частицами они не могут обменяться местами. Чтобы получить частицу 1 в связанном состоянии, нужно и начинать со связанной частицей 1 и свободной частицей 2.

Это и есть поверхностные волны, упомянутые выше, которые становятся заметными в функции Грина, если только источник помещается на одной из осей координат. В самом деле, подробное исследование природы этой функции Грина (в детали которого здесь нет надобности входить; мы не пытаемся просчитать эту задачу, а хотим только осмотреть все возможные случаи, чтобы понять их общие особенности, которые, как мы надеемся, помогут в понимании подобных особенностей в других задачах с несколькими частицами) показывает, что мы здесь имеем дело с расходящейся круговой волной, зависящей от угла и стремящейся к нулю вдоль оси (являющейся пределом первичной волны и соответствующего ей отражения в случае слияния источника и изображения), и ее отражением, зависящим от угла и идущим из точки  $(-x_0, 0)$ ; кроме того, здесь имеется также поверхностная волна вида, указанного в равенстве (12.3.72), распространяющаяся от источника и отраженная от  $x=0$ . Если источник расположен на оси  $x$ , требуется, чтобы обе эти волны вдоль оси  $x$  удовлетворяли некоторым условиям. Отметим, что длина волны у поверхностной волны равна  $2\pi/k_a$ , т. е. меньше длины волны свободных волн  $2\pi/k$ , так как  $k_a^2 = k^2 + a^2$ , если  $\varepsilon = k^2$ .

Поведение этих волн становится ясным, если воспользоваться представлением функции Грина в виде ряда и интеграла от произведений собственных функций однородного уравнения, составленных для источника и наблюдателя [см. (7.2.39), (7.2.41) и (7.2.42)]. В данном случае функция Грина состоит из двойного интеграла от выражений для свободных волн, взятого по всем значениям волновых чисел  $k_1$  и  $k_2$ , сложенного с отдельными интегралами от поверхностных волн, распространенными на все значения соответствующих величин  $k$ ; к сумме добавляется еще член, соответствующий связанному состоянию. Если источник или наблюдатель помещаются далеко от оси  $x$  или от оси  $y$ , то членами, соответствующими поверхностным волнам и связанному состоянию, можно пренебречь; вблизи осей становятся существенными члены, соответствующие поверхностным волнам; вблизи начала координат важен член, зависящий от связанного состояния.

Следовательно, если имеем некоторое распределение источников на плоскости, решение неоднородного уравнения будет содержать интеграл от обычной функции Грина, распространенный на всю область распределения источников, и интеграл от той части функции Грина, которая соответствует поверхностным волнам; последний интеграл распространяется на всю совокупность источников, лежащих на осях координат.

**Влияние взаимодействия между частицами.** Посмотрим теперь, как будет обстоять дело, если мы примем во внимание взаимодействие между



двумя частицами. Предположим, что это взаимодействие описывается короткодействующей силой отталкивания с потенциалом в виде дельта-функции от  $x - y$ , имеющей разрыв вдоль оси  $\xi$ , являющейся биссектрисой угла между осями  $x$  и  $y$  рис. 12.7. Здесь волновая функция, вместо того чтобы иметь гребень вдоль осей  $x$  и  $y$ , как это было для поля притяжения, имеет «желоб», причем разрыв нормальной производной положителен. Добавление этого потенциала взаимодействия сразу значительно усложняет задачу. Прежде всего несколько искажается симметрия системы; здесь имеется потенциальный гребень или «зеркало» вдоль оси  $\xi$ , но его нет вдоль оси  $\eta$ . Это зеркало вызывает обмен энергиями между частицами; если мы посылаем теперь волну, в которой частица 1 имеет скорость  $v_1 = \hbar k_1/M$ , а частица 2 — скоростью  $v_2 = \hbar k_2/M$ , то для части отраженной волны  $x$  и  $y$  обменяются ролями и, таким образом, частица 1 будет двигаться со скоростью  $v_2$ , а частица 2 — со скоростью  $v_1$ .

Даже в случае, когда обе частицы свободны, дополнительное зеркало вызывает в начале координат осложнения, которые нельзя обойти, пользуясь простой суммой плоских волн. Можно, например, попытаться рассмотреть случай, когда частица 1 движется справа со скоростью  $v_1$  (волновое число  $k_1$ ), а частица 2 — слева с меньшей скоростью  $v_2$  (волновое число  $-k_2$ ). Направление распространения падающей волны составляет с осью  $x$  угол, меньший  $\pi/4$ , и эта волна приходит из бесконечности в IV квадрант. Часть этой волны отразится от оси  $x$  (частица 2 отразится от начала координат), а часть — от оси  $y$  (частица 1 отразится от начала координат), но некоторая часть пройдет через эти «зеркала» и натолкнется на новое зеркало вдоль оси  $\xi$ , от которого и отразится. Это соответствует отражению частицы 1 от частицы 2 и обмену кинетическими энергиями; направление отраженной волны будет теперь  $\pi/2$  — и в соответствии с тем, что частица 1 имеет волновое число  $k_2$ , а частица 2 — волновое число  $-k_1$ .

До сих пор все ясно; но если мы будем в том же духе продолжать, добавляя в каждой части плоскости различные волны, отраженные от каждого зеркала, а также и прошедшие через эти зеркала, и требуя, чтобы разрывы производных по нормали к  $x=0$  или к  $y=0$  были равны  $-2a\psi$ , как и раньше, а разрывы производных по нормали к  $\eta=0$  были равны  $+2b\psi$ , то мы найдем, что нельзя сделать задачу «замкнутой», что мы имеем либо недостаточно составляющих волн, либо слишком много условий сопряжения. Если  $b=0$ , некоторые из этих дополнительных условий исчезают, и задачу можно решить с помощью комбинаций плоских волн, но это случай, рассмотренный выше, когда нет взаимодействия между частицами. Как только мы примем во внимание взаимодействие, конечная сумма плоских волн окажется недостаточной для того, чтобы удовлетворить всем условиям сопряжения, а также и требованию периодичности относительно полярного угла  $\varphi$  (т. е. требованию, чтобы волна во II квадранте, полученная при переходе из IV квадранта через I квадрант, должна быть такой же, как и при переходе через III квадрант).

Очевидно, что начало координат, где сходятся все зеркала, само по себе дает некоторое количество отражений и посылает волну, содержащую в себе как поверхностные, так и «свободные» волны. Новое зеркало при  $\eta=0$  не дает поверхностных волн вдоль него самого: этому препятствует знак  $b$ , но присутствие этого зеркала превращает часть волны в поверхностные волны. На «языке частиц» сила взаимодействия вызывает возможный обмен энергией между частицами; в частности, если обе частицы вначале были свободны, то одна частица может отдать энергию и перейти в связанное состояние, а другая частица уйдет с остальной энергией.

Некоторые из этих фактов становятся более ясными, если заменить дифференциальное уравнение движения пары частиц

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + [\varepsilon + 2a\delta(x) + 2a\delta(y)] \psi = 2b\delta(x-y) \psi \quad (12.3.73)$$

интегральным уравнением

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \frac{-b}{2\pi} \int \int \delta(x_0 - y_0) \psi(x_0, y_0) G_k(x, y | x_0, y_0) dx_0 dy_0 = \\ &= -\frac{b}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x_0, x_0) G_k(x, y | x_0, x_0) dx_0, \end{aligned} \quad (12.3.74)$$

где  $G_k$  — функция Грина для источника в точке  $(x_0, y_0)$ , полученная интегрированием выражения (12.3.69) по  $u$  при  $\varepsilon = k^2$ . Это уравнение выражает решение  $\psi$  в точке  $(x, y)$  через значения его вдоль оси  $\xi$  ( $x=y$ ), где расположен «гребень» возмущающего потенциала. Решение образовано с помощью умноженного на  $-b/2\pi$  значения  $\psi$  в каждой точке оси  $\xi$ , являющейся источником, порождающим волны в остальной части пространства. Если в это уравнение подставить точное выражение  $\psi$  для точек, лежащих вдоль оси  $\xi$ , то получим точное решение  $\psi$ ; но даже в случае, когда  $\psi$  на оси  $\xi$  точно неизвестно, приближенное выражение, будучи подставлено под знак интеграла, дает очень хорошее приближение для  $\psi$  в остальной части плоскости.

Интегральное уравнение для  $\psi(x, y)$  вдоль оси  $\xi$  получается, если положить  $y = x = \xi/\sqrt{2}$ . Если  $\varphi_0(\xi) = \psi(\xi/\sqrt{2}, \xi/\sqrt{2})$  есть значение  $\psi$  в точке  $(\xi, 0)$  оси  $\xi$  и если  $G_k(\xi | \xi_0) = G_k(\xi/\sqrt{2}, \xi/\sqrt{2} | \xi_0/\sqrt{2}, \xi_0/\sqrt{2})$  есть значение функции Грина в точке  $(\xi, 0)$  для единичного источника, находящегося в точке  $(\xi_0, 0)$ , то интегральное уравнение принимает вид

$$\varphi_0(\xi) = -\frac{b}{\sqrt{8\pi^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(\xi_0) G_k(\xi | \xi_0) d\xi_0. \quad (12.3.75)$$

Решив это уравнение, мы можем решение для  $\varphi_0$  подставить в уравнение (12.3.74), чтобы получить общее решение  $\psi$  для энергии  $\varepsilon = k^2$ .

Ядро  $G_k(\xi | \xi_0)$  при действительном  $k$  является комбинацией расходящихся волн, если  $\xi > \xi_0$ ; оно представляет собой комбинацию волн обоих направлений при  $0 < \xi < \xi_0$  и комбинацию волн, идущих к  $\xi \rightarrow -\infty$ , если  $\xi < 0$ ; кроме того, при  $\xi_0 = 0$  это ядро является сингулярной функцией, интегрирование которой по  $\xi_0$  дает значение  $\varphi_0$  при  $\xi = 0$ , умноженное на функцию, соответствующую поверхностным волнам — комбинацию действительной и мнимой экспоненциальных функций. Мы не собираемся подсчитывать  $\varphi_0$  или даже  $G_k(\xi | \xi_0)$ . Из общих свойств функции Грина  $G_k(x, y | x_0, y_0)$ , которые мы уже обрисовали, а также из вида уравнения (12.3.74) можно видеть без вычислений, какого типа будет функция  $\psi(x, y)$ .

Рассмотрим прежде всего случай двух свободных частиц. Точное решение уравнения (12.3.73), как мы видели, не может быть выражено с помощью падающей плоской волны и отраженных плоских волн. Тем не менее значения  $\psi$  вдоль оси  $\xi$  не слишком отличаются от значений вдоль оси  $\xi$  функции  $\psi$ , определенной равенствами (12.3.69) (решение без учета взаимодействия). Если эти значения подставить в уравнение (12.3.74), то результат интегрирования даст достаточно хорошее приближение к решению уравнения (12.3.73).

Интегрирование по большей части промежутка изменения  $\xi_0$  ( $= x_0 \sqrt{2}$ ) соответствует дополнительным отражениям плоской волны, определенной

в (12.3.69), от добавочного «зеркала» вдоль оси  $\xi$ . Однако в дополнение к этим отраженным волнам имеется еще член, зависящий от сингулярной части  $G$ , который порождает поверхностные волны, распространяющиеся от начала координат вдоль обеих осей  $x$  и  $y$ , плюс известное количество круговых волн, расходящихся по радиусам из начала координат; амплитуда этих волн пропорциональна значению функции  $\psi$  в начале координат.

**Смысл результатов.** Сформулируем теперь этот результат на языке частиц. Мы рассматриваем движение двух частиц из бесконечности — одной со скоростью  $v_1$ , другой со скоростью  $v_2$ . Здесь могут представиться следующие возможности: во-первых, обе частицы могут пройти через потенциальную долину в начале координат с их первоначальными скоростями (волна, прошедшая сквозь «зеркала»); во-вторых, одна частица может отразиться от начала координат и, возвращаясь оттуда, двигаться с первоначальной скоростью, в то время как другая проходит через начало координат с ее первоначальной скоростью (волны, отраженные от «зеркала», расположенного вдоль оси  $x$  или вдоль оси  $y$ ); наконец, обе частицы могут отразиться от начала координат, но сохранить при этом их первоначальные скорости (волна, отраженная от обоих «зеркал», расположенных по осям  $x$  и  $y$ ). Таковы возможности, если не учитывать влияния взаимодействия частиц, т. е. «зеркала», расположенного вдоль оси  $\xi$ .

При наличии взаимодействия между частицами здесь дополнительно могут представиться следующие возможности: во-первых, обе частицы, покидая линию  $x = y$  в любом направлении, могут обменяться своими скоростями (плоские волны, отраженные от «зеркала», расположенного вдоль оси  $\xi$ ); во-вторых, в начале координат, где действуют одновременно все три потенциала, одна частица может перейти в связанное состояние, а другая — уйти из начала в том или другом направлении со скоростью, соответствующей энергии, полученной там (поверхностные волны); наконец, может случиться (со сравнительно малой вероятностью), что в начале координат одна частица отдает часть своей кинетической энергии другой частице и обе они уходят со скоростями, отличными от их начальных скоростей, но такими, что сумма их кинетических энергий равна первоначальной сумме (круговые волны, расходящиеся по радиусам из начала координат). Все возможности, указанные в последнем предложении, получают благодаря наличию взаимодействия между частицами, которое приводит к задаче, в которой разделение невозможно, и порождает разнообразные осложнения (и возможности) в случае систем, состоящих из нескольких частиц.

Если взаимодействие было бы притяжением, вместо предполагавшегося здесь отталкивания, то возникла бы еще одна дополнительная расходящаяся поверхностная волна вдоль оси  $\xi$ , соответствующая частицам, которые покидают начало координат, будучи связанными друг с другом; оставшаяся энергия будет их общей кинетической энергией.

Прежде чем перейти к задачам, более тесно связанным с действительностью, выскажем еще одно последнее соображение; мы должны указать, как сила взаимодействия изменяет волновую функцию для случая, когда обе частицы связаны. Мы могли бы рассчитать это из уравнения (12.3.74), воспользовавшись функцией Грина, составленной из убывающих по экспоненциальному закону функций Ганкеля мнимого аргумента, но здесь будет достаточно показать, придерживаясь нашего картинного изложения, как изменится функция, имевшая форму «крыши пагоды», рассмотренная на стр. 660. Если сила взаимодействия является силой отталкивания, то энергия связи частиц уменьшается и  $\psi$  на больших расстояниях будет стремиться к нулю медленнее, чем  $\phi$ , определенное в (12.3.70). По-видимому, «гребни крыши» вдоль осей  $x$  и  $y$  спускаются вниз от вер-

шины в начале координат по экспоненциальному закону с показателем, меньшим чем  $a$  в (12.3.70). «Угол крыши» на этих гребнях должен быть таким же, как и раньше, так как он определяется потенциальными долинами, расположенными вдоль осей  $x$  и  $y$ .

Однако в дополнение к гребням при отталкивающей силе взаимодействия на крыше появляется V-образный «желоб» вдоль оси  $\xi$ . Мы можем получить его, заставив крышу в квадрантах II и IV немного «выпучиться», так что горизонтальные функции  $\psi$  («линии черепицы») становятся кривыми, обращенными вогнутостью к началу координат. В квадрантах I и III крыша тогда опускается вниз более круто вдали от гребней, идущих вдоль осей  $x$  и  $y$  с небольшим дополнительным уменьшением кривизны, дающим возможность двум частям соединиться вдоль оси  $\xi$  с образованием V-образного «желоба». Если отталкивающее взаимодействие очень велико, желоб нельзя сделать V-образным с нужной крутизной, не «сморщив» крышу где-либо в другом месте; это равносильно утверждению, что при очень большой силе отталкивающего взаимодействия не может быть связанного состояния, одна частица или обе должны быть свободны. Если сила взаимодействия является силой притяжения, то вдоль оси  $\xi$  появляется новый «гребень», и крыша должна немного «осесть» между гребнями (вместо того, чтобы выпучиться) для того, чтобы это компенсировать. Оседание или выпучивание дополнительно указывают на то, что простые показательные функции не достаточны для представления решения; таким образом, решение существенно не разделимо.

**Связанные гармонические осцилляторы.** Только связанные гармонические осцилляторы представляют собой допускающий разделение переменных случай взаимодействующих частиц; этот случай не демонстрирует многих результатов, выведенных в предшествующем пункте, так как здесь нет свободных состояний. Если частота колебаний каждой частицы самой по себе в силовом поле равна  $\omega/2\pi$  и если две частицы притягивают друг друга с силой  $C(x-y)$ , то уравнение Шредингера, аналогичное уравнению (12.3.5) для системы, имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + [\varepsilon - \beta^2 x^2 - \beta^2 y^2 - \gamma^2 (x-y)^2] \psi = 0,$$

где  $\varepsilon = 2ME/\hbar^2$ ,  $\beta = M\omega/\hbar = (1/\hbar)\sqrt{KM}$  и  $\gamma = (1/\hbar)\sqrt{CM}$ . Это уравнение удобнее выразить в нормальных координатах  $\xi$ ,  $\eta$ , где

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \eta), \quad y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \eta),$$

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y), \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - y).$$

Уравнение тогда приобретает форму, допускающую разделение переменных,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + [\varepsilon - \beta^2 \xi^2 - \beta^2 \eta^2] \psi = 0, \quad (12.3.76)$$

где

$$\beta^2 = \beta^2 + \gamma^2 = \frac{M}{\hbar^2}(K + C) = \left(\frac{M\omega_+}{\hbar}\right)^2, \quad \omega_+^2 = \omega^2 + \frac{C}{M}.$$

Решение, согласно формуле (12.3.7), имеет вид

$$\psi_{mn}(\xi, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi^2 m! n!}} e^{-\frac{1}{2}\beta^2 \xi^2 - \frac{1}{2}\beta_+ \eta^2} H_m(\xi\sqrt{\beta}) H_n(\eta\sqrt{\beta_+}) \quad (12.3.77)$$

с соответствующими энергиями

$$E_{mn} = \hbar\omega \left( m + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_+ \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

Заметим, что мы не можем сказать, что частица 1 имеет определенную энергию и частица 2 имеет некоторую определенную энергию, как мы могли бы это сделать, если бы константа взаимодействия  $C$  была равна нулю. Здесь квантовые числа  $m$  и  $n$  оба относятся к *обеим частицам*.

Все уровни поднимаются при взаимодействии на величину, равную разности между  $\hbar\omega_+(n + 1/2)$  и  $\hbar\omega(n + 1/2)$  (последняя величина являлась бы значением уровня, если бы здесь не было взаимного притяжения). Наименее измененными состояниями являются те, в которых  $n = 0$ , что соответствует малой амплитуде движения в направлении оси  $\eta$ ; частицы при своих колебаниях движутся более или менее вместе. Взаимодействие уничтожает вырождение уровней. При  $C = 0$   $n$ -й уровень имеет  $(n + 1)$ -кратное вырождение; при малом, но не равном нулю  $C$ , уровни больше не налагаются друг на друга, но распределяются равномерно между наимизшим из них  $\hbar\omega(n + 1/2) + \hbar\omega_+/2$  и наивысшим  $\hbar\omega/2 + \hbar\omega_+(n + 1/2)$ .

Заметим (это будет иметь значение в дальнейшем), что состояния могут различаться по их симметрии относительно перестановки частиц. Состояния с *четными* значениями  $n$  не изменяются, когда  $x$  и  $y$  меняются местами ( $\eta$  меняет знак), в то время как при *нечетном* целочисленном  $n$  от перестановки  $x$  и  $y$  функция  $\psi$  меняет знак. Говорят, что первые состояния имеют *четную симметрию*, вторые — *нечетную симметрию*. Заметим также, что взаимодействие не оказывает влияния на функцию или энергии для координаты  $\xi$ .

**Поля центральных сил, несколько частиц, момент количества движения.** Поведение нескольких одинаковых частиц в поле центральных сил при наличии сил взаимодействия между частицами является наиболее интересной проблемой этого рода, так как решение этой проблемы обрисовывает нам с очень хорошим приближением положение дел в атоме со многими электронами и с полезным (хотя и не очень точным) приближением положение дел в ядре со многими частицами. Уравнение Шредингера без учета потенциалов взаимодействия имеет вид

$$\left[ \sum_{n=1}^N \nabla^2 + \varepsilon - \sum_{n=1}^N v(r_n) \right] \psi = 0. \quad (12.3.78)$$

Если нет взаимодействия, то можно указать определенную энергию для каждой частицы, причем полная энергия системы равна сумме энергий отдельных частиц, а волновая функция равна произведению функций  $\psi$  для отдельных частиц.

Последнее, однако, не обязательно; если мы обменяем между собой энергии и функции  $\psi$  какой-либо пары частиц, полная энергия остается прежней; система имеет  $(N!)$ -кратное вырождение, связанное с обменом состояниями между частицами. Но, как и в случае любого вырожденного состояния (см. стр. 623), мы не обязаны выбирать именно эти факторизованные функции в качестве собственных функций; собственной функцией будет также любая линейная комбинация  $N!$  функций для одного и того же значения  $\varepsilon$ ; эти комбинации желательно выбрать так, чтобы они были «подходящими» для сил взаимодействия, которые в конечном итоге будут приложены. Если мы принимаем во внимание взаимодействие, мы, конечно, не можем сказать, что частица с номером  $n$  имеет определенную энергию; все, что здесь можно сказать, это то, что система как целое имеет энергию  $\varepsilon$ . (Заметим, хотя входить в детали вопроса мы здесь не можем, что

для некоторых частиц принцип Паули значительно уменьшает это вырождение добавлением требования, чтобы  $\psi$  меняло знак при перестановке частиц.)

Те же замечания можно сделать относительно моментов количества движения. Факторизованные решения уравнения (12.3.78) соответствуют тому, что каждая частица имеет определенный полный момент количества движения, отмеченный квантовым числом  $l_i$  (см. стр. 612), и определенную составляющую этого момента вдоль полярной оси, соответствующую квантовому числу  $m_i$ . Однако в действительности, если принять во внимание взаимодействие, отдельные частицы не имеют определенных моментов количества движения; в этом случае можно сказать только, что  $N$  частиц, рассматриваемые как целое, имеют суммарный момент количества движения,

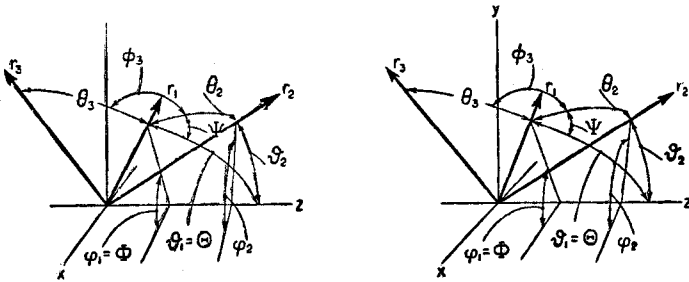


Рис. 12.9. Углы, встречающиеся при вычислении суммарного момента количества движения системы.

заданный квантовым числом  $l$ , и что составляющая вдоль полярной оси этого момента равна  $\hbar m$ . Интересно найти, какие комбинации факторизованных функций  $\psi$  соответствуют данным  $l$  и  $m$  или, что равносильно (см. стр. 627), в каких системах координат мы можем отделить оператор суммарного момента количества движения.

Одна из возможных систем координат, правда, не такая симметричная, как хотелось бы, но в данный момент удовлетворяющая нас, определяется следующим образом. Направление радиуса-вектора  $\mathbf{r}_1$  одной из частиц принимается за новое направление полярной оси. Это направление определяется углом  $\Theta = \vartheta_1$  между  $\mathbf{r}_1$  и прежней полярной осью  $z$  и углом  $\Phi = \varphi_1$  между плоскостью  $(\mathbf{r}_1, z)$  и плоскостью  $(x, z)$  (см. рис. 12.9). Направление радиусов-векторов  $\mathbf{r}_n$  остальных частиц определяется относительно радиуса-вектора  $\mathbf{r}_1$  и плоскости  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  ( $\mathbf{r}_2$  — радиус-вектор второй выбранной нами частицы); угол между плоскостью  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и плоскостью  $(\mathbf{r}_1, z)$ , обозначаемый через  $\Psi$ , определяет вместе с углами  $\Theta$  и  $\Phi$  общую ориентацию новой системы в пространстве. Три угла  $\Theta$ ,  $\Phi$  и  $\Psi$  являются эйлеровыми углами системы [см. (1.3.8)].

Ориентация радиуса-вектора  $\mathbf{r}_n$  определяется углом  $\theta_n$  между  $\mathbf{r}_n$  и  $\mathbf{r}_1$  и углом  $\phi_n$  между плоскостью  $(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$  и плоскостью  $(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_1)$ . Соотношения между этими углами и обычными сферическими углами  $\vartheta_n, \varphi_n$ , определяющими ориентацию  $\mathbf{r}_n$  относительно оси  $z$  и плоскости  $(x, z)$ , имеют вид

$$\begin{aligned} \vartheta_1 &= \Theta, \quad \varphi_1 = \Phi, \\ \cos \vartheta_2 &= \cos \Theta \cos \theta_2 + \sin \Theta \sin \theta_2 \cos \Psi, \\ \sin \vartheta_2 \sin (\varphi_2 - \Phi) &= \sin \theta_2 \sin \Psi, \\ &\dots \dots \dots \\ \cos \vartheta_n &= \cos \Theta \cos \theta_n + \sin \Theta \sin \theta_n \cos (\Psi + \phi_n), \\ \sin \vartheta_n \sin (\varphi_n - \Phi) &= \sin \theta_n \sin (\Psi + \phi_n), \quad n > 2. \end{aligned} \tag{12.3.79}$$

После довольно сложных вычислений все координаты  $r_n, \vartheta_n, \varphi_n$  могут быть

выражены через новые координаты  $r_1, r_2, \dots, r_N, \Phi, \Theta, \Psi, \theta_2, \theta_3, \phi_3, \dots, \theta_N, \phi_N$  и волновое уравнение (12.3.78) может быть преобразовано к этим координатам. К сожалению, новые координаты не будут взаимно ортогональными, так что полученное уравнение будет несколько громоздким. Однако является существенным, что часть его, содержащая углы Эйлера  $\Theta, \Phi, \Psi$ , отделяется и может быть решена сама по себе.

Однако более простой путь получения уравнения для множителя волновой функции, зависящего от углов Эйлера, состоит в том, чтобы выразить компоненты суммарного момента количества движения в виде операторов относительно новых координат (см. стр. 612). Окончательно получим

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_x &= \frac{\hbar}{i} \left[ -\cos \Phi \operatorname{ctg} \Theta \frac{\partial}{\partial \Phi} - \sin \Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{\cos \Phi}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Psi} \right], \\ \mathcal{M}_y &= \frac{\hbar}{i} \left[ -\sin \Phi \operatorname{ctg} \Theta \frac{\partial}{\partial \Phi} + \cos \Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{\sin \Phi}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Psi} \right], \\ \mathcal{M}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi}. \end{aligned}$$

Уравнение для собственных значений  $B$  и собственных функций  $\Upsilon$  оператора  $\mathcal{M}^2/\hbar^2$  имеет тогда вид

$$(1 + \operatorname{ctg}^2 \Theta) \frac{\partial^2 \Upsilon}{\partial \Phi^2} + \frac{\partial^2 \Upsilon}{\partial \Theta^2} + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 \Upsilon}{\partial \Psi^2} - \frac{2 \operatorname{ctg} \Theta}{\sin \Theta} \frac{\partial^2 \Upsilon}{\partial \Phi \partial \Psi} + \operatorname{ctg} \Theta \frac{\partial \Upsilon}{\partial \Theta} + B \Upsilon = 0. \quad (12.3.80)$$

Углы  $\Phi$  и  $\Psi$  циклические и множители, соответствующие им, являются тригонометрическими функциями целочисленных кратных  $\Phi$  и  $\Psi$ . Как принято в квантовой механике, мы предпочитаем ввести комплексную экспоненту и положим

$$\Upsilon = e^{im\Phi + ik\Psi} H(\Theta),$$

где  $m, k$  — любые целые, положительные или отрицательные числа. Уравнение, остающееся для  $H$ , может быть переведено в гипергеометрическое уравнение, если положить

$$H = \sin^d \left( \frac{\Theta}{2} \right) \cos^s \left( \frac{\Theta}{2} \right) F(\Theta),$$

где  $d$  — абсолютная величина разности квантовых чисел  $|m - k|$ , а  $s$  — абсолютная величина суммы  $|m + k|$ . Тогда, если положить  $z = (1/2)(1 - \cos \Theta) = \sin^2(\Theta/2)$ , уравнение для  $F$  принимает вид

$$z(1-z) \frac{d^2 F}{dz^2} + [c - (a+b+1)z] \frac{dF}{dz} - abF = 0,$$

где

$$\begin{aligned} c &= 1 + d, \quad a + b = 1 + d + s, \\ ab &= (d + s)(d + s + 2) - B, \\ d &= |m - k|, \quad s = |m + k|. \end{aligned}$$

Это — обычное гипергеометрическое уравнение. Решение, конечное при  $\Theta = 0$ , дается рядом  $F(a, b|1 + d|z)$ ; второе решение тогда бесконечно. Однако этот ряд обращается в бесконечность при  $\Theta = \pi$  ( $z = 1$ ), если ни одно из чисел  $a$  или  $b$  не равно целому отрицательному числу  $-\nu$ ; следовательно, конечными решениями уравнения (12.3.80) являются только

$$\Upsilon = e^{im\Phi + ik\Psi} \sin^d \left( \frac{\Theta}{2} \right) \cos^s \left( \frac{\Theta}{2} \right) F \left[ -\nu, 1 + d + s + \nu | 1 + d | \sin^2 \left( \frac{\Theta}{2} \right) \right]$$

при соответствующих значениях  $B$  — собственных значениях оператора  $\mathcal{M}^2/\hbar^2$

$$B = \left( \nu + \frac{d+s}{2} \right) \left( \nu + \frac{d+s}{2} + 1 \right) = l(l+1),$$

$$l = \nu + \frac{1}{2}(d+s) = 0, 1, 2, \dots,$$

что доказывает, что квадрат суммарного момента количества движения всех частиц в случае центральной силы (с учетом взаимодействий, если они имеются) равен  $\hbar^2 l(l+1)$ , а проекция его на ось  $z$  равна  $\hbar m$ . Величина  $(d+s)/2$  является ббльшим из целых чисел  $|m|$  и  $|k|$ .

Чтобы свойства этих собственных функций сделать более ясными, выразим их через число  $l$ . Сначала мы предположим, что  $m$  положительно: при отрицательных значениях  $m$  мы можем рассматривать функцию, комплексно сопряженную полученной. Тогда при данных  $m$  и  $l$  будем иметь  $2l+1$  различных собственных функций, так как  $k$  может принимать значения от  $+l$  до  $-l$ . Если  $|k| \leq m$ , функции имеют форму

$$\Upsilon_{lmk} = e^{im\Phi + ik\Psi} \sin^m(\Theta) \operatorname{ctg}^k\left(\frac{\Theta}{2}\right) F\left[ m-l, l+m+1 \mid m-k+1 \mid \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) \right].$$

При  $l \geq k > m$  они принимают вид

$$\Upsilon_{lmk} = e^{im\Phi + ik\Psi} \sin^k(\Theta) \operatorname{ctg}^m\left(\frac{\Theta}{2}\right) F\left[ k-l, l+k+1 \mid k-m+1 \mid \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) \right], \quad (12.3.81)$$

в то время как при  $-l \leq k < -m$  имеем

$$\Upsilon_{lmk} = e^{im\Phi + ik\Psi} \sin^{-k}(\Theta) \operatorname{tg}^m\left(\frac{\Theta}{2}\right) F\left[ -k-l, l-k+1 \mid m-k+1 \mid \sin^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) \right].$$

Для получения полного решения уравнения (12.3.78) нужно составить линейную комбинацию произведений этих функций от  $\Phi$ ,  $\Theta$  и  $\Psi$  на функции от  $r_1, r_2, \dots, r_N, \theta_2, \theta_3, \dots, \theta_N, \phi_3, \phi_4, \dots, \phi_N$ . Если даже добавить в уравнение (12.3.78) потенциалы взаимодействия, чтобы получить полное уравнение Шредингера для системы, эти взаимодействия будут зависеть только от значений  $r_n$  и от углов относительного положения  $\theta_2, \dots, \phi_N$ , но не от  $\Phi, \Theta, \Psi$ , так что множители  $\Upsilon$  остаются прежними, хотя другие множители изменяются под влиянием взаимодействий. Тем не менее множители  $\Upsilon$  не являются вполне правильными множителями, входящими в окончательное решение, если «включается» взаимодействие.

Правильными множителями, входящими в это решение, будут линейные комбинации функций  $\Upsilon$ , классифицированных относительно 1) их поведения при инверсии системы координат и 2) их симметричности или антисимметричности при перестановке какой-либо пары частиц. Так как потенциалы взаимодействия инвариантны относительно инверсии и симметричны при перестановке какой-либо пары частиц, окончательная волновая функция  $\psi$  всегда может быть выражена через собственные функции, которые будут четными или нечетными относительно инверсии и симметричными или антисимметричными относительно перестановки частиц<sup>1)</sup>.

<sup>1)</sup> Утверждение авторов, что собственная функция обязательно будет симметричной или антисимметричной относительно перестановки частиц, справедливо только для систем из двух одинаковых частиц. В случае большего числа одинаковых частиц возможные типы симметрии волновой функции не исчерпываются симметрией или антисимметрией. Возможные типы симметрии описываются так называемыми схемами Юнга. Принцип Паули, требующий антисимметрии, полной (включающей и спиновые переменные) волновой функции системы, ограничивает типы симметрии координатной части волновой функции (допуская только схемы Юнга не более чем с двумя столбцами). — *Прим. ред.*



**Инверсия и четность.** Операция *инверсии* определяется как замена всех координат каждой частицы противоположными им по знаку величинами, т. е.

$$\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i.$$

Операция инверсии равносильна переходу от обычной правой системы координат к левой системе. Взаимодействия, которые зависят только от расстояний между частицами, будут, конечно, инвариантными при таком преобразовании, так что, если  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$  является решением уравнения Шредингера, то  $\psi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, \dots)$  будет также решением с той же энергией и с теми же квантовыми числами момента количества движения. Так как существует только одно такое решение, то обе функции  $\psi$  должны быть пропорциональны друг другу:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = \alpha \psi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, \dots).$$

Применяя операцию инверсии к обеим частям этого равенства, найдем:  $\alpha^2 = 1$ , так что  $\alpha = \pm 1$ . Если

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = -\psi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, \dots),$$

то говорят, что волновая функция является *нечетной*, в то время как в случае сохранения знака при инверсии функция является *четной*.

Волновая функция  $\psi$  состоит из суммы произведений функций  $\Upsilon$  и функций от расстояний между частицами. Таким образом, выбор правильных линейных комбинаций функций  $\Upsilon$  фиксирует четность. Для определения их следует отметить поведение углов Эйлера при инверсии

$$\Theta \rightarrow \pi - \Theta, \quad \Phi \rightarrow \pi + \Phi, \quad \Psi \rightarrow \pi - \Psi.$$

Примеры подходящих линейных комбинаций в случае, когда  $l = 1$ , будут даны ниже.

**Симметризация для систем, состоящих из двух частиц.** Процесс симметризации обычно довольно утомителен. Как он протекает, можно иллюстрировать рассмотрением случая двух частиц. Здесь обмен частиц 1 и 2 заменяет  $\Theta$  через  $\vartheta_2$  и  $\Phi$  через  $\varphi_2$ , где  $r_2$ ,  $\vartheta_2$  и  $\varphi_2$  — координаты частицы 2 в сферической системе координат. Решение уравнения

$$[\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \varepsilon - v(r_1) - v(r_2) - \omega(r_{12})] \psi = 0$$

должно быть выражено как линейная комбинация произведений функций  $\Upsilon$  и функций  $f$  от  $r_1$ ,  $r_2$  и  $\theta_2 = \vartheta_{12}$ . Так как  $r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \vartheta_{12}$ , мы видим, что полная потенциальная энергия совершенно не зависит от  $\Phi$ ,  $\Theta$  и  $\Psi$ . Мы должны найти дифференциальное уравнение для множителей  $f$ , для каждой надлежащей комбинации функций  $\Upsilon$ .

Наиболее легкий способ достигнуть этого состоит в том, чтобы рассмотреть, что происходит, когда  $\omega$  стремится к нулю, и сравнить результаты с формой функций  $\Upsilon$ . В этом случае решение должно быть линейной комбинацией произведений одночастичных волновых функций, имеющих общую форму

$$u = e^{im_1\varphi_1 + im_2\varphi_2} P_{l_1}^{m_1}(\cos \vartheta_1) P_{l_2}^{m_2}(\cos \vartheta_2) R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_2}(r_2),$$

т. е. выражений типа, рассмотренного на стр. 666 и следующих. Рассмотрим сначала случай  $l = 0$  (суммарный момент количества движения равен нулю). Здесь функция  $\Upsilon$  является постоянной и не зависит от  $\Phi$ ,  $\Theta$  и  $\Psi$ , так что полное решение, которое является линейной комбинацией функций  $u$  при  $\omega = 0$ , должно быть функцией только от  $\theta_2 = \vartheta_{12}$ ,  $r_1$  и  $r_2$ .

Такая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \psi^0 &= f_{l_1 m_1 n_2}^0(\vartheta_2, r_1, r_2) = P_{l_1}(\cos \vartheta_{12}) R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_1}(r_2) = \\ &= \left\{ \sum_{m_1=0}^{l_1} \varepsilon_{m_1} \cos[m_1(\varphi_1 - \varphi_2)] \frac{(l_1 - m_1)!}{(l_1 + m_1)!} P_{l_1}^{m_1}(\cos \vartheta_1) P_{l_1}^{m_1}(\cos \vartheta_2) \right\} R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_1}(r_2), \\ & \qquad \qquad \qquad \omega = 0, \quad (12.3.82) \end{aligned}$$

и соответствует двум частицам, имеющим равные, но направленные в противоположные стороны моменты ( $l_2 = l_1; m_2 = -m_1$ ), так что суммарный момент количества движения равен нулю. Конечно, мы могли бы воспользоваться комбинацией таких функций для различных значений  $l_1$ , но различные значения  $l_1$  соответствуют различным энергиям даже в случае отсутствия взаимодействия.

Следовательно, только функция, приведенная в равенстве (12.3.82) для данной невозмущенной энергии  $\varepsilon_{n_1 l_1 n_2 l_1}$ , имеет суммарный момент количества движения, равный нулю; это имеет место только для тех невозмущенных энергий, для которых  $l_2 = l_1$ . Отправляясь от формы функции  $f^0$ , мы видим, что дифференциальное уравнение для  $f$  в случае, когда  $l = m = 0$  ( $\Gamma$  постоянно,  $\psi = f^0$ ), имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left( r_1^2 \frac{\partial f^0}{\partial r_1} \right) + \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left( r_2^2 \frac{\partial f^0}{\partial r_2} \right) + \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \frac{1}{\sin \vartheta_{12}} \frac{\partial}{\partial \vartheta_{12}} \left( \sin \vartheta_{12} \frac{\partial f^0}{\partial \vartheta_{12}} \right) + \\ + [\varepsilon - v(r_1) - v(r_2) - \omega(r_{12})] f^0 = 0; \quad (12.3.83) \end{aligned}$$

это уравнение остается в силе даже в случае, когда  $\omega$  не равно нулю. Конечно, при  $\omega \neq 0$   $f^0$  не будет больше пропорциональной  $P_{l_1}(\cos \vartheta_{12})$ ; зависимость от  $\vartheta_{12}$  является более сложной, так как  $\omega(r_{12})$  зависит от  $\vartheta_{12}$ . У нас  $\psi^0$  оказывается симметричной по отношению к перестановке частиц 1 и 2 для всех состояний; она не зависит от угла  $\varphi_2 - \varphi_1$ , изменение которого на противоположный меняет местами частицы пары.

Обращаясь теперь к случаю  $l = 1$ , мы имеем девять возможностей для  $\Upsilon_{1mk}$ :

	$k = 1$	$k = 0$	$k = -1$
$m = 1$	$e^{i\Phi + i\Psi} (1 + \cos \Theta)$	$e^{i\Phi} \sin \Theta$	$e^{i\Phi - i\Psi} (1 - \cos \Theta)$ ,
$m = 0$	$e^{i\Psi} \sin \Theta$	$\cos \Theta$	$e^{-i\Psi} \sin \Theta$ ,
$m = -1$	$e^{-i\Phi + i\Psi} (1 - \cos \Theta)$	$e^{-i\Phi} \sin \Theta$	$e^{-i\Phi - i\Psi} (1 + \cos \Theta)$ .

Вместо того чтобы классифицировать решения по значениям  $k$ , мы будем различать их в соответствии с их четностью и абсолютной величиной  $k$ . Такими решениями будут:

	$ k  = 1$ , четные	$ k  = 1$ , нечетные	$k = 0$ , нечетные
$m = 1$	$e^{i\Phi} [\cos \Psi + i \sin \Psi \cos \Theta]$	$e^{i\Phi} [i \sin \Psi +$	$e^{i\Phi} \sin \Theta$
		$+ \cos \Psi \cos \Theta]$	
$m = 0$	$\sin \Psi \sin \Theta$	$\cos \Psi \sin \Theta$	$\cos \Theta$
$m = -1$	$e^{-i\Phi} [\cos \Psi - i \sin \Psi \cos \Theta]$	$e^{-i\Phi} [i \sin \Psi -$	$e^{-i\Phi} \sin \Theta$ .
		$- \cos \Psi \cos \Theta]$	

Для данного  $m$  окончательное выражение для симметричных и антисимметричных волновых функций может содержать линейные комбинации волновых функций только одинаковой четности. Заметим также, что, так как мы имеем девять независимых состояний, мы должны после симмет-

ризации иметь точно девять независимых волновых функций. Возвращаясь к векторному описанию, мы можем сказать, что эти девять состояний (или их линейные комбинации) соответствуют моментам количества движения двух электронов, которые ориентированы друг относительно друга так, что для суммы векторов  $l=1$ . Это может произойти в трех случаях: отдельные значения  $l$  равны и не антипараллельны;  $l_1 = l_2 + 1$  и два вектора антипараллельны; наконец,  $l_1 = l_2 - 1$  и два вектора антипараллельны. Для каждого из этих трех случаев имеем три ориентации суммарного момента количества движения относительно оси  $z$ .

Начиная с тройки, соответствующей случаю  $m=0$ , мы сначала берем четную волновую функцию  $\sin \Psi \sin \Theta$ . Мы смотрим, можно ли найти решение вида  $\psi = \sin \Psi \sin \Theta f(\theta_2, r_1, r_2)$ , которое может быть разложено (при  $\omega=0$ ) на множители типа  $u$ . Соответствующая комбинация имеет вид

$$\begin{aligned} \psi^0 &= \sin \Psi \sin \Theta P_{l_1}^1(\cos \theta_2) R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_1}(r_2) = \\ &= \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \sin(\varphi_2 - \varphi_1) T_{l_1-1}^1(\cos \theta_2) R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_1}(r_2). \end{aligned}$$

Но, согласно формуле сложения полиномов Гегенбауэра, имеем

$$\begin{aligned} \sin(\varphi_2 - \varphi_1) T_{l_1-1}^1(\cos \theta_2) &= 2 \sum_{m_1=1}^{l_1} \frac{m_1 (l_1 - m_1)!}{(l_1 + m_1)!} [\sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2]^{m_1-1} \times \\ &\times T_{l_1-m_1}^{m_1}(\cos \vartheta_1) T_{l_1-m_1}^{m_1}(\cos \vartheta_2) \sin [m_1(\varphi_2 - \varphi_1)]. \end{aligned}$$

Следовательно, подходящая комбинация для  $\omega=0$  имеет вид

$$\begin{aligned} \sin \Psi \sin \Theta f^0 &= \sin \Psi \sin \Theta P_{l_1}^1(\cos \vartheta_{12}) R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_1}(r_2) = \\ &= 2 \sum_{m_1=1}^{l_1} \frac{m_1 (l_1 - m_1)!}{(l_1 + m_1)!} P_{l_1}^{m_1}(\cos \vartheta_1) P_{l_1}^{m_1}(\cos \vartheta_2) \sin [m_1(\varphi_2 - \varphi_1)] R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_1}(r_2) \end{aligned}$$

и соответствующее уравнение для  $f(\vartheta_{12}, r_1, r_2)$  (даже при  $\omega \neq 0$ ) имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left( r_1^2 \frac{\partial f}{\partial r_1} \right) + \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left( r_2^2 \frac{\partial f}{\partial r_2} \right) + \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \left[ \frac{1}{\sin \vartheta_{12}} \frac{\partial}{\partial \vartheta_{12}} \left( \sin \vartheta_{12} \frac{\partial f}{\partial \vartheta_{12}} \right) - \right. \\ \left. - \frac{f}{\sin^2 \vartheta_{12}} \right] + [\varepsilon - v(r_1) - v_2(r_2) - \omega(r_{12})] f = 0, \quad (12.3.84) \end{aligned}$$

что отличается от уравнения (12.3.83) при  $l=0$  членом, содержащим  $\sin^{-2} \vartheta_{12}$ . Эти функции соответствуют случаю, когда обе частицы имеют одно и то же  $l$ , с суммой векторов, равной единице, и с нулевой составляющей вдоль оси  $z$ . Так как функция меняет знак при перемене знака  $\varphi_2 - \varphi_1$ , то она антисимметрична относительно перестановки частиц.

Другая пара функций при  $m=0$  более сложна, почему мы особо рассмотрим функцию, соответствующую перестановке частиц  $\tilde{f} = f(\vartheta_{12}, r_2, r_1)$ . Чтобы сократить уже достаточно длинное рассуждение, мы указываем результаты без подробных доказательств. Составляем комбинацию, являющуюся нечетной:

$$\psi = \cos \Theta [f(\vartheta_{12}, r_1, r_2) + \cos \vartheta_{12} f(\vartheta_{12}, r_2, r_1)] + \sin \Theta \cos \Psi \sin \vartheta_{12} f(\vartheta_{12}, r_2, r_1).$$

В случае когда  $\omega=0$ , можно положить  $f^0(\vartheta_{12}, r_1, r_2) = P_{l_1}(\cos \vartheta_{12}) R_1(r_1) R_2(r_2)$ ; в этом случае после небольших преобразований получаем

$$\begin{aligned} \psi^0 &= \cos \vartheta_1 P_{l_2}(\cos \vartheta_{12}) R_1(r_1) R_2(r_2) + \cos \vartheta_2 P_{l_2}(\cos \vartheta_{12}) R_2(r_1) R_1(r_2) = \\ &= F(1, 2) + F(2, 1), \end{aligned}$$

где

$$F(1, 2) = \sum_{m_1=0}^{l_2} \frac{\varepsilon_{m_1}}{(2l_2+1)} \cos [m_1 (\varphi_1 - \varphi_2)] P_{l_2}^{m_1}(\cos \vartheta_2) \times \\ \times \left[ \frac{(l_2 - m_1 + 1)!}{(l_2 + m_1)!} P_{l_2+1}^{m_1}(\cos \vartheta_1) + \frac{(l_2 - m_1)!}{(l_2 + m_1 - 1)!} P_{l_2-1}^{m_1}(\cos \vartheta_1) \right] R_1(r_1) R_2(r_2),$$

а  $F(2, 1)$  получается отсюда заменой  $\vartheta_1, \varphi_1$  и  $r_1$  через  $\vartheta_2, \varphi_2$  и  $r_2$ . Это, очевидно, является комбинацией состояний с антипараллельными моментами количества движения частиц, где одна или другая частица имеет  $l$  на единицу больше или на единицу меньше, чем другая; требования симметрии перемешивают обе возможности. Очевидно также, что эти функции не изменяются при перестановке частиц. Уравнение для  $f(\vartheta_{12}, r_1, r_2)$  в этом случае содержит член с обращенной функцией  $\tilde{f} = f(\vartheta_{12}, r_2, r_1)$ :

$$\frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left( r_1^2 \frac{\partial f}{\partial r_1} \right) + \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left( r_2^2 \frac{\partial f}{\partial r_2} \right) + \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \frac{1}{\sin \vartheta_{12}} \frac{\partial}{\partial \vartheta_{12}} \left( \sin \vartheta_{12} \frac{\partial f}{\partial \vartheta_{12}} \right) + \\ + \frac{2}{r_1^2} \left( \operatorname{ctg} \vartheta_{12} \frac{\partial f}{\partial \vartheta_{12}} - f \right) - \frac{2}{r_2^2 \sin \vartheta_{12}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vartheta_{12}} + [\varepsilon - v(r_1) - v(r_2) - \omega] f = 0. \quad (12.3.85)$$

Третья комбинация, антисимметричная относительно перестановки частиц и снова нечетная, имеет вид

$$\psi = \cos \Theta [f - \cos \vartheta_{12} \tilde{f}] - \sin \Theta \cos \Psi \sin \vartheta_{12} \tilde{f}$$

и при  $\omega = 0$  сводится к

$$\cos \vartheta_1 P_{l_2}(\cos \vartheta_{12}) R_1(r_1) R_2(r_2) - \cos \vartheta_2 P_{l_2}(\cos \vartheta_{12}) R_2(r_1) R_1(r_2).$$

Уравнение для  $f$  (при  $\omega \neq 0$ ) имеет теперь вид

$$\frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} \left( r_1^2 \frac{\partial f}{\partial r_1} \right) + \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left( r_2^2 \frac{\partial f}{\partial r_2} \right) + \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \frac{1}{\sin \vartheta_{12}} \frac{\partial}{\partial \vartheta_{12}} \left( \sin \vartheta_{12} \frac{\partial f}{\partial \vartheta_{12}} \right) + \\ + \frac{2}{r_1^2} \left( \operatorname{ctg} \vartheta_{12} \frac{\partial f}{\partial \vartheta_{12}} - f \right) + \frac{2}{r_2^2 \sin \vartheta_{12}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \vartheta_{12}} + [\varepsilon - v(r_1) - v(r_2) - \omega] f = 0, \quad (12.3.86)$$

что снова соответствует состоянию, в котором одна частица имеет момент, на единицу больший или на единицу меньший чем другая; проекция суммарного момента количества движения на ось  $z$  равна нулю. Уравнение для  $f$  отличается от уравнения (12.3.85) только знаком перед членом, содержащим  $\partial \tilde{f} / \partial \vartheta_{12}$ .

Остальные шесть состояний могут быть скомбинированы подобным же образом; ниже мы выписываем сводку результатов

$$\begin{aligned} \psi_{11s} &= e^{i\Phi} [f_{11s} \sin \Theta + \tilde{f}_{11s} (\sin \Theta \cos \vartheta_{12} + i \sin \Psi \sin \vartheta_{12} + \cos \Theta \cos \Psi \sin \vartheta_{12})] = \\ &= e^{i\varphi_1} \sin \vartheta_1 f_{11s} + e^{i\varphi_2} \sin \vartheta_2 \tilde{f}_{11s}, \\ \psi_{11a} &= e^{i\varphi_1} \sin \vartheta_1 f_{11a} - e^{i\varphi_2} \sin \vartheta_2 \tilde{f}_{11a}, \\ \psi_{110} &= e^{i\Phi} (\cos \Psi - i \cos \Theta \sin \Psi) f_{110} = \\ &= -(e^{i\varphi_1} \sin \vartheta_1 \cos \vartheta_2 - e^{i\varphi_2} \cos \vartheta_1 \sin \vartheta_2) \operatorname{cosec} \vartheta_{12} f_{110}, \\ \psi_{10s} &= f_{10s} \cos \Theta + \tilde{f}_{10s} (\cos \Theta \cos \vartheta_{12} + \sin \Theta \sin \vartheta_{12} \cos \Psi) = \cos \vartheta_1 f_{10s} + \cos \vartheta_2 \tilde{f}_{10s}, \\ \psi_{10a} &= \cos \vartheta_1 f_{10a} - \cos \vartheta_2 \tilde{f}_{10a}, \\ \psi_{100} &= \sin \Psi \sin \Theta f_{100}, \\ \psi_{1, -1s} &= \bar{\psi}_{11s}, \quad \psi_{1, -1a} = \bar{\psi}_{11a}, \quad \psi_{1, -10} = \bar{\psi}_{110}; \end{aligned} \quad (12.3.87)$$

первый индекс у  $\psi$  дает значение суммарного момента количества движения  $l$ , второй—его компоненту  $m$  вдоль оси  $z$ , а последний—свойства симметрии  $\psi$ . Множители  $f$  с последним индексом 0 являются решениями уравнения (12.3.84), а с индексом  $a$ —удовлетворяют уравнению (12.3.86); соответствующие функции  $\psi$  антисимметричны относительно перестановки частиц. Множители  $f$  с последним индексом  $s$  удовлетворяют уравнению (12.3.85), а соответствующие  $\psi$  симметричны относительно перестановки частиц. Однако эти функции видоизменяются, если частицы имеют спины, которые также взаимодействуют.

Исследование при  $l > 1$  остается в основном тем же, но становится несколько более утомительным. При  $l = 2$  имеем 25 различных функций, соответствующих случаю, когда сумма векторов моментов количества движения одной частицы равна 2 с пятью различными ориентациями суммарного момента относительно оси  $z$ . Такая результирующая может получиться, если частица 2 имеет  $l_2$ , лежащее между  $l_1 - 2$  и  $l_1 + 2$ , что и дает  $5 \times 5$  состояний. Истинные решения являются различными их линейными комбинациями, а уравнения для соответствующих  $f(\delta_{12}, r_1, r_2)$  все неразделимы, если взаимодействие  $w(r_{12}) \neq 0$ . Соответствующее исследование для более чем двух частиц будет утомительнее.

**Связанные, свободные и «поверхностные» состояния.** Во многих случаях, представляющих интерес, члены, содержащие потенциальную энергию  $v(r_n)$  и  $w(r_{mn})$ , стремятся к нулю при больших значениях радиального аргумента. Положение подобно рассмотренному на стр. 657 и следующим, но только пространство конфигураций, соответствующее функциям  $\psi$ , будет  $3N$ -мерным. Для положительных энергий допустимы все значения, и большая часть состояний соответствует тому, что все частицы являются свободными, движутся из бесконечности, отражаются от потенциальной «ямы» вблизи начала координат и удаляются обратно к бесконечности. Возможные состояния соответствуют «плоской» волне  $\exp(\sum ik_n \cdot r_n)$  для падающей части при энергии  $\epsilon = \sum k_n^2$ . Если члены взаимодействий  $w$  равны нулю, каждая частица подвергается действию только своего собственного потенциала  $v(r_n)$ , что отвечает отражению плоской волны от каждой из  $3N - 3$  гиперповерхностей, соответствующих тому, что каждая из частиц по очереди проходит через начало. Эти гиперповерхности занимают место «зеркал» в прежнем примере.

В дополнение к «наклонным» волнам, когда каждая частица свободна, здесь встречаются «поверхностные» волны, соответствующие случаям, когда одна или несколько частиц находятся в связанном состоянии; эти волны сосредоточены вблизи того или другого гиперповерхностного «зеркала» из числа упомянутых в предыдущем абзаце. Энергия  $\epsilon$  этих поверхностных волн может быть положительной, а также и отрицательной, когда энергия связи связанных частиц (являющаяся отрицательной) численно больше суммы кинетических энергий свободных частиц. Следовательно, для части отрицательной области энергии имеет непрерывные допустимые значения. Эти состояния поверхностных волн всегда вырождены, так как связанной может быть какая-либо одна частица, а остальные свободны. Однако до тех пор, пока мы пренебрегаем взаимодействиями, эти состояния «не перемешиваются»; если одна из частиц вначале была связанной, она остается связанной. Наконец, существуют строго дискретные уровни энергии, соответствующие состояниям, в которых все частицы связаны. [Иногда этих состояний нет, как, например, для кулоновского поля  $Ze^2/r$  с несколько большим количеством электронов, чем значение  $Z$  для поля.] Эти связанные состояния имеют волновые функции, которые велики только вблизи начала координат; значения энергии этих состояний отрицательны, хотя некоторые из этих дискретных уровней (для нескольких частиц в высших связанных состоя-

ниях) могут быть выше возможных непрерывных уровней для некоторых из поверхностных волн. До тех пор пока нет взаимодействий, ни одно из этих состояний не «смешивается» с другими.

Введение членов, содержащих взаимодействие  $\omega$ , добавляет дополнительные «зеркала», расположенные вдоль тех гиперповерхностей, которые соответствуют двум частицам, совпадающим по своему положению. Как и в случае простой задачи, рассмотренной раньше, эти дополнительные члены сразу «перемешивают» предыдущие состояния. Такое «перемешивание» может произойти либо благодаря новым отражениям от этих дополнительных зеркал (одна частица обменивается состоянием с другой), либо благодаря возможности перехода «наклонных» волн в «поверхностные» (одна частица переходит в связанное состояние, отдавая излишнюю энергию другой частице) или наоборот, либо, наконец, благодаря возникновению дополнительных «гиперсферических расходящихся» волн, идущих от  $3N$ -мерного

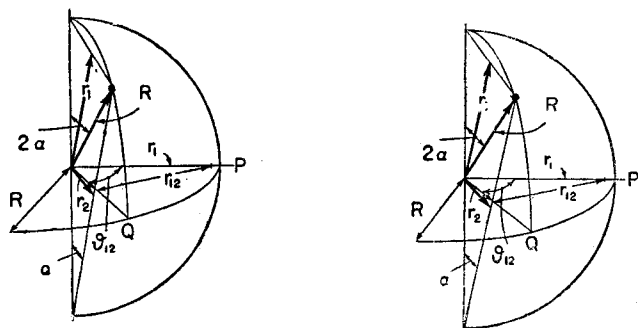


Рис. 12.10. Геометрическое построение, связывающее  $R$  и  $\alpha$  с  $r_1$ ,  $r_2$  и  $\vartheta_{12}$ .

начала координат [все частицы перераспределяют свои кинетические энергии, приобретая новые волновые числа  $k'_n$ , подчиненные только условию  $\sum (k'_n)^2 = \sum (k_n)^2 = \varepsilon$ ].

Это характерное поведение может быть иллюстрировано с помощью модели из двух частиц, рассмотренной в двух предыдущих пунктах. Часть функции  $\psi$ , зависящая от углов Эйлера, может быть отделена, так как она определяет ориентацию системы в пространстве, а не относительную ориентацию двух радиус-векторов. Этот множитель  $\gamma$  является линейной комбинацией функций, определенных в (12.3.82). Множитель  $f$ , зависящий от длин радиус-векторов  $r_1$  и  $r_2$  и угла между ними  $\vartheta_{12}$ , изменяется, когда «включаются» силы, действующие между частицами. Отметим, что если пренебречь членом взаимодействия  $\omega$ , то этот множитель превращается в произведение сферической функции от  $\cos \vartheta_{12}$  и радиальных функций от  $r_1$  и  $r_2$ .

Волновую функцию можно описать несколько лучше, если перейти к гиперсферическим координатам  $R$  и  $\alpha$ , таким, что  $r_1 = R \cos \alpha$ ,  $r_2 = R \sin \alpha$ . Множитель  $f$  будет тогда функцией от  $R$ ,  $2\alpha$  и  $\vartheta_{12}$ . Геометрическая связь символически изображена на рис. 12.10, где  $2\alpha$  изменяется от 0 до  $\pi$ , как и  $\vartheta_{12}$ , так что нам достаточно только четырех октантов. Построение, нужное для получения  $r_1$  и  $r_2$ , показано на рисунке: если один из них расположен на линии  $OP$ , а другой на  $OQ$ , то расстояние между их концами равно  $r_{12}$ . В этой геометрической схеме связанные состояния имеют множители  $f$ , остающиеся малыми везде, кроме точек, близких к началу координат; «поверхностные» волны сосредоточены вблизи полярных осей  $2\alpha = 0$ ,  $2\alpha = \pi$ ; силы взаимодействия велики вблизи линии  $2\alpha = \pi/2$ ,  $\vartheta_{12} = 0$  (линия  $OP$ ). Однако геометрическая схема только символична, так как масштабные множители для этих координат не соответствуют действительным масштабным множителям.

**Функция Грина для системы двух частиц.** Для того чтобы продолжить изучение поведения системы двух частиц в центральном силовом поле при наличии взаимодействия, необходимо найти функцию Грина для двух частиц при отсутствии центрального поля и взаимодействия. Для этой цели нужно решить шестимерное неоднородное уравнение Гельмгольца

$$[\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + k^2]G = -\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2).$$

Наиболее «физической» системой координат для выражения  $G$  будет система  $\Phi, \Theta, \Psi, \vartheta_{12}, \alpha$  и  $R$ , содержащая углы Эйлера, рассмотренные несколькими страницами раньше. Но эти координаты не ортогональны; лучше сначала разложить  $G$  в ортогональных координатах, а после разложения, если нужно, изменить полученные ряды.

Наиболее употребительной ортогональной системой, не слишком отличающейся от системы с углами Эйлера, а также не слишком отличающейся от системы, применяемой в случае, когда частицы рассматриваются отдельно, будет *гиперсферическая система для двух частиц*, определенная следующим образом:

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cos \alpha \sin \vartheta_1 \cos \varphi_1, & x_2 &= r \sin \alpha \sin \vartheta_2 \cos \varphi_2, \\ y_1 &= r \cos \alpha \sin \vartheta_1 \sin \varphi_1, & y_2 &= r \sin \alpha \sin \vartheta_2 \sin \varphi_2, \\ z_1 &= r \cos \alpha \cos \vartheta_1, & z_2 &= r \sin \alpha \cos \vartheta_2, \\ h_r &= 1, & h_\alpha &= r, & h_{\vartheta_1} &= r \cos \alpha, & h_{\varphi_1} &= r \cos \alpha \sin \vartheta_1, \\ h_{\vartheta_2} &= r \sin \alpha, & h_{\varphi_2} &= r \sin \alpha \sin \vartheta_2, & r_1 &= r \cos \alpha, & r_2 &= r \sin \alpha, \\ r_{12} &= r \sqrt{1 - \sin 2\alpha [\cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)]}. \end{aligned} \quad (12.3.88)$$

Элемент объема в этих координатах имеет вид

$$r^5 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 d\vartheta_1 d\vartheta_2 d\varphi_1 d\varphi_2 d\alpha dr,$$

площадь поверхности гиперсферы радиуса  $r$  равна  $\pi^3 r^5$ , а уравнение Гельмгольца преобразуется к виду

$$\begin{aligned} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + k^2)\psi &\doteq \frac{1}{r^5} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^5 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left( \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \frac{\partial \psi}{\partial \alpha} \right) + \\ &+ \frac{1}{r^2 \cos^2 \alpha} \left[ \frac{1}{\sin \vartheta_1} \frac{\partial}{\partial \vartheta_1} \left( \sin \vartheta_1 \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta_1} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi_1^2} \right] + \\ &+ \frac{1}{r^2 \sin^2 \alpha} \left[ \frac{1}{\sin \vartheta_2} \frac{\partial}{\partial \vartheta_2} \left( \sin \vartheta_2 \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta_2} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi_2^2} \right] + k^2 \psi = 0. \end{aligned} \quad (12.3.89)$$

Зависимость функции  $\psi$  от величин  $\varphi$  и  $\vartheta$  хорошо известна; соответствующие множители являются сферическими функциями с квантовыми числами  $l_1, m_1, l_2, m_2$ , и результаты операций в квадратных скобках равны соответственно  $l_1(l_1+1)\psi$  и  $l_2(l_2+1)\psi$ . Уравнение для множителя, зависящего от  $\alpha$ , имеет вид

$$\frac{1}{\sin^2 \alpha \cos^2 \alpha} \frac{d}{d\alpha} \left( \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \frac{dA}{d\alpha} \right) - \left[ \frac{l_1(l_1+1)}{\cos^2 \alpha} + \frac{l_2(l_2+1)}{\sin^2 \alpha} \right] A = -BA,$$

что может быть преобразовано в уравнение для гипергеометрической функции от  $\sin^2 \alpha$ . Решение, конечное при  $\alpha = 0$ , а также соответствующее значение постоянной разделения  $B$  имеют вид

$$A = \cos^{l_1} \alpha \sin^{l_2} \alpha F \left( -n, l_1 + l_2 + n + 2 \left| l_2 + \frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha \right), \quad (12.3.90)$$

$$B = (l_1 + l_2 + 2n)(l_1 + l_2 + 2n + 4),$$

где  $n$  должно быть равно нулю или положительному целому числу, так

как  $A$  должно быть конечным при  $\alpha = \pi/2$ ; в этом случае  $F$  является конечным полиномом (полиномом Якоби) с  $n+1$  членами.

Окончательное уравнение для радиального множителя функции  $\psi$  имеет вид

$$\frac{1}{r^5} \frac{d}{dr} \left( r^5 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ k^2 - \frac{(l_1 + l_2 + 2n + 2)^2 - 4}{r^2} \right] R = 0$$

и его решения выражаются через функции Бесселя  $r^{-2} J_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr)$  или  $r^{-2} N_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr)$ . Следовательно, полное решение уравнения (12.3.89), конечное при  $r = 0$ , имеет вид

$$\begin{aligned} \psi = & \frac{\cos}{\sin} (m_1 \varphi_1) P_{l_1}^{m_1} (\cos \vartheta_1) \frac{\cos}{\sin} (m_2 \varphi_2) P_{l_2}^{m_2} (\cos \vartheta_2) \cos^{l_1} \alpha \sin^{l_2} \alpha \times \\ & \times F \left( -n, l_1 + l_2 + n + 2 \left| l_2 + \frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha \right) \frac{1}{r^2} J_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr). \end{aligned}$$

Для расходящихся волн мы пользуемся функцией Ганкеля  $H_{l_1 + l_2 + 2n + 2}^{(1)}(kr)$  вместо функции  $J$ ; в этом случае  $\psi$ , очевидно, бесконечна при  $r = 0$ .

Функция Грина может быть выражена через шестимерное расстояние  $R$  между источником и наблюдателем, определенное равенством

$$\begin{aligned} R^2 = & (r)^2 + (r')^2 - \\ & - 2rr' \cos \alpha \cos \alpha' [\cos \vartheta_1 \cos \vartheta_1' + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_1' \cos (\varphi_1 - \varphi_1')] - \\ & - 2rr' \sin \alpha \sin \alpha' [\cos \vartheta_2 \cos \vartheta_2' + \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_2' \cos (\varphi_2 - \varphi_2')]. \end{aligned}$$

Очевидно, что

$$G_k(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \frac{ik^2}{16\pi^2 R^2} H_2^{(1)}(kR) \simeq \begin{cases} \frac{1}{4\pi^3 R^4}, & kR \ll 1, \\ \frac{1}{2} ik^4 & \\ \frac{e^{ikR}}{(2\pi ikR)^{3/2}}, & kR \gg 1. \end{cases} \quad (12.3.94)$$

Нас интересует также выражение  $G$  в координатах наблюдателя  $r, \alpha, \dots, \varphi_2$  и координатах источника  $r', \alpha', \dots, \varphi_2'$  относительно произвольного начала и произвольной полярной оси. Это выражение может быть получено методом, намеченным в гл. 7. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} G_k(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = & \frac{i}{16\pi (rr')^2} \times \\ & \times \sum_{l_1 l_2 n} (2l_1 + 1)(2l_2 + 1) \frac{(l_1 + l_2 + 2n + 2)(l_1 + l_2 + n + 1)! \Gamma\left(l_2 + n + \frac{3}{2}\right)}{n! \left[ \Gamma\left(l_2 + \frac{3}{2}\right) \right]^2 \Gamma\left(l_1 + n + \frac{3}{2}\right)} \times \\ & \times \cos^{l_1} \alpha \sin^{l_2} \alpha F\left(-n, l_1 + l_2 + n + 2 \left| l_2 + \frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha\right) \times \\ & \times \cos^{l_1} \alpha' \sin^{l_2} \alpha' F\left(-n, l_1 + l_2 + n + 2 \left| l_2 + \frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha'\right) \times \\ & \times \left\{ \sum_{m_1 m_2} \varepsilon_{m_1} \varepsilon_{m_2} \frac{(l_1 - m_1)! (l_2 - m_2)!}{(l_1 + m_1)! (l_2 + m_2)!} \cos [m_1 (\varphi_1 - \varphi_1')] \cos [m_2 (\varphi_2 - \varphi_2')] \times \right. \\ & \times P_{l_1}^{m_1} (\cos \vartheta_1) P_{l_1}^{m_1} (\cos \vartheta_1') P_{l_2}^{m_2} (\cos \vartheta_2) P_{l_2}^{m_2} (\cos \vartheta_2') \left. \right\} \times \\ & \times \begin{cases} J_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr) H_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr'), & r < r', \\ J_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr') H_{l_1 + l_2 + 2n + 2}(kr), & r > r'. \end{cases} \quad (12.3.92) \end{aligned}$$

Отсюда можно получить выражение для «плоской волны»; пусть, например, частица 1 движется вдоль оси  $z_1$  из  $-\infty$  с волновым числом



$k_1 = Mv_1/\hbar = k \cos \beta$ , а частица 2 — с волновым числом  $k_2 = Mv_2/\hbar = k \sin \beta$  в направлении  $\theta$  в плоскости  $x_2, z_2$ . Поместим источник в точке  $r' \rightarrow \infty$ ,  $\alpha' = \beta$ ,  $\vartheta'_1 = -\pi$ ,  $\vartheta'_2 = -\theta$ ,  $\varphi'_2 = \pi$  и сравним выражения (12.3.91) и (12.3.92):

$$\begin{aligned} \exp [ikr \cos \beta \cos \alpha \cos \vartheta_1 + ikr \sin \beta \sin \alpha (\cos \theta \cos \vartheta_2 + \sin \theta \sin \vartheta_2 \cos \varphi_2)] = \\ = \frac{\pi}{k^2 r^2} \sum_{l_1 l_2 n} (-1)^n i^{l_1+l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) \times \\ \times \frac{(l_1+l_2+2n+2)(l_1+l_2+n+1)! \Gamma\left(l_2+n+\frac{3}{2}\right)}{n! \left[\Gamma\left(l_2+\frac{3}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(l_1+n+\frac{3}{2}\right)} \times \\ \times \cos^{l_1} \alpha' \sin^{l_2} \alpha' F\left(-n, l_1+l_2+n+2 \left| l_2+\frac{3}{2} \right| \sin^2 \beta\right) \cos^{l_1} \alpha \sin^{l_2} \alpha \times \\ \times F\left(-n, l_1+l_2+n+2 \left| l_2+\frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha\right) P_{l_1}(\cos \vartheta_1) J_{l_1+l_2+2n+2}(kr) \times \\ \times \left\{ \sum_{m_2=0}^{l_2} \varepsilon_{m_2} \frac{(l_2-m_2)!}{(l_2+m_2)!} P_{l_2}^{m_2}(\cos \theta) P_{l_2}^{m_2}(\cos \vartheta_2) \cos(m_2 \varphi_2) \right\}. \quad (12.3.93) \end{aligned}$$

Пользуясь функциями Грина в каком-либо интегральном уравнении, мы часто имеем дело только с решениями данной симметрии или данной ориентации; в таких случаях следует пользоваться только той частью  $G$ , которая имеет сама соответствующую симметрию или ориентацию. Так как все собственные функции в формуле (12.3.92) принадлежат ортогональной системе, другие члены входить не должны. Это свойство рядов полезно в частности, когда мы имеем дело с функциями данного суммарного момента количества движения; мы можем тогда отобрать только часть ряда, соответствующую данным  $l$  и  $m$  и пользоваться ею одною.

Например, из равенства (12.3.82) видно, что функция, для которой суммарный момент количества движения равен нулю, имеет форму  $P_{l_1}(\cos \vartheta_{12}) R_1(r_1) R_2(r_2)$ . Поэтому часть  $G$ , для которой  $l=0$ , соответствует той части суммы при  $l_2=l_1$ ,  $m_2=m_1$ , которая симметрична относительно  $(\varphi_1 - \varphi_2)$ :

$$\begin{aligned} G_{l=0}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \frac{i}{8\pi (rr')^2} \sum_{n l_1} (2l_1+1) \frac{(l_1+n+1)(2l_1+n+1)!}{n! \left[\Gamma\left(l_1+\frac{3}{2}\right)\right]^2} \times \\ \times (\sin \alpha' \cos \alpha')^{l_1} F\left(-n, 2l_1+n+2 \left| l_1+\frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha'\right) (\sin \alpha \cos \alpha)^{l_1} \times \\ \times F\left(-n, 2l_1+n+2 \left| l_1+\frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha\right) P_{l_1}(\cos \vartheta_{12}) P_{l_1}(\cos \vartheta_{12}) \times \\ \times \begin{cases} J_{2l_1+2n+2}(kr) H_{2l_1+2n+2}(kr'), & r < r', \\ J_{2l_1+2n+2}(kr') H_{2l_1+2n+2}(kr), & r > r'; \end{cases} \end{aligned}$$

здесь частная сумма не зависит от углов Эйлера  $\Phi$ ,  $\Theta$  и  $\Psi$ . Заметим, что

$$F\left(-n, n+2l+2 \left| l+\frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha\right) = \frac{2^{l+\frac{1}{2}} n! \Gamma(l+3/2)}{(n+2l+1)!} T_n^{l+\frac{1}{2}}(\cos 2\alpha).$$

Подобные частные суммы можно составить для других значений  $l$  и  $m$ , воспользовавшись, например, комбинациями (12.3.87). Каждая из этих частных сумм является комбинацией функций от  $\Phi$ ,  $\Theta$ ,  $\Psi$ , умноженных на функции от  $\alpha$ ,  $\alpha'$ ,  $\vartheta_{12}$ ,  $\vartheta'_{12}$ ,  $r$  и  $r'$ . В некоторых случаях мы должны пользоваться функциями для переставленных частиц. Это достигается перестановкой  $\vartheta_1, \varphi_1$  с  $\vartheta_2, \varphi_2$  и заменой  $\alpha$  на  $\pi/2 - \alpha$ , что переставляет  $r_1$  и  $r_2$ .

В таких случаях мы можем воспользоваться соотношением

$$F\left(-n, l_1 + l_2 + n + 2 \left| l_2 + \frac{3}{2} \right| \sin^2 \alpha\right) = \\ = (-1)^{l_1 + l_2 + n} \frac{\Gamma\left(l_2 + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(l_1 + \frac{3}{2}\right)} F\left(-n, l_1 + l_2 + n + 2 \left| l_1 - \frac{3}{2} \right| \cos^2 \alpha\right),$$

чтобы найти правильную комбинацию.

Иногда применяется также несколько иное представление функции Грина, а именно представление с помощью интеграла Фурье. Методами, уже хорошо нам знакомыми, находим

$$G_k(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \frac{1}{64\pi^6} \int \dots \int \frac{e^{i\xi_1(x_1-x'_1) + \dots + i\xi_2(z_2-z'_2)}}{\xi_1^2 + \dots + \xi_2^2 - k^2} d\xi_1 \dots d\xi_2, \quad (12.3.94)$$

где шестикратное интегрирование производится по составляющим  $\xi_1, \eta_1, \zeta_1, \xi_2, \eta_2, \zeta_2$  волновых векторов по прямоугольным осям. Этот интеграл, если необходимо, можно преобразовать к гиперсферическим координатам с помощью равенств (12.3.88); в этом случае обычно удобно преобразовать также и пространство волновых векторов к гиперсферическим координатам с «радиусом»  $x$  и пятью углами.

**Связанные состояния.** Для связанных состояний мы должны найти и допустимую энергию и соответствующую волновую функцию. Для расчета энергии можно воспользоваться вариационным методом. Мы можем тогда улучшить форму волновой функции, воспользовавшись результатами вариационных расчетов в интегральном уравнении для  $\psi$ , применяя функцию Грина (см. гл. 9). Интеграл, минимум которого мы ищем, для двух частиц имеет вид

$$H = \int \dots \int \bar{\varphi} [-\nabla_1^2 - \nabla_2^2 + v(r_1) + v(r_2) + w(r_{12})] \varphi dv_1 dv_2.$$

Минимальное значение  $H$  для нормированной волновой функции  $\varphi$  равно допустимому значению энергии.

В качестве простого примера можно рассмотреть атом с зарядом ядра, равным  $Ze$ , имеющий два связанных электрона в их наинизших состояниях. В этом случае  $v(r) = Zq^2/r$  и  $w(r_{12}) = q^2/r_{12}$ , где  $q^2 = 2Me^2/\hbar^2$ ,  $e$  — заряд электрона. Очень простая волновая функция для этого состояния имеет вид

$$\varphi = \frac{\mu^3}{\pi} e^{-\mu(r_1+r_2)}.$$

Эта функция уже нормирована. Так как  $\varphi$  симметрична, часть интеграла, соответствующая кинетической энергии, равна

$$T = -2 \int \dots \int \bar{\varphi} \nabla_1^2 \varphi dv_1 dv_2 = 2\mu^2.$$

Среднее потенциала ядра равно

$$V = -2Zq^2 \int \dots \int \frac{1}{r_1} \varphi^2 dv_1 dv_2 = -2\mu Zq^2.$$

Интеграл для потенциала взаимодействия получается с помощью разложения  $1/r_{12}$  в ряд по сферическим функциям

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \vartheta_{12}) \begin{cases} \frac{r_1^n}{r_2^{n+1}}, & r_2 > r_1, \\ \frac{r_2^n}{r_1^{n+1}}, & r_1 > r_2. \end{cases}$$

Поскольку волновая функция не зависит от  $\vartheta_{12}$ , в интеграле играет роль

только первый член этого ряда, так что имеем

$$W = q^2 \int \dots \int \varphi^2 \frac{1}{r_{12}} dv_1 dv_2 = \\ = 16\mu^6 q^2 \int_0^\infty e^{-2\mu r_1} r_1^2 dr_1 \left[ \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-2\mu r_2} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-2\mu r_2} r_2 dr_2 \right] = \frac{5}{8} \mu q^2.$$

Следовательно,  $H = 2\mu^2 - 2\mu q^2(Z - 5/16)$ ; наилучшее значение  $\mu$  является корнем уравнения  $dH/d\mu = 0$  и оно равно  $\mu = (1/2)q^2(Z - 5/16)$ ; наилучшее значение энергии наимизшего связанного состояния, которое может быть получено при этой простой форме пробной функции, равно

$$\varepsilon \simeq -\frac{1}{2} \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 q^4, \text{ или } E \simeq -\left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \frac{Me^4}{\hbar^2}. \quad (12.3.95)$$

Это действительно дает достаточно хорошее приближенное значение энергии, несмотря на явную недостаточность пробной функции. Измеренные значения энергии для наимизших состояний системы с двумя электронами при  $Z = 2, 3, 4, 5, 6$  (He, Li<sup>+</sup>, Be<sup>++</sup>, B<sup>+++</sup>, C<sup>++++</sup>) в единицах  $-Me^4/\hbar^2$  равны

$$-2\varepsilon_{\text{экср.}} = 5,807; 14,560; 27,313; 44,065; 64,813,$$

в то время, как соответствующие значения из выражения (12.3.95) равны

$$-2\varepsilon = 5,695; 14,445; 27,195; 43,945; 64,695;$$

почти постоянная разность дает ошибку меньше двух процентов для  $Z = 2$  и меньше 0,2% для  $Z = 6$ . В действительности чрезвычайно хорошим выражением для  $\varepsilon$  было бы  $-(1/2)(Z - 5/16)^2 - 0,120$ .

Мы можем теперь подставить это приближенное выражение для  $\phi$  в правую часть интегрального уравнения, образованного с помощью функции Грина, полученной в предыдущем пункте,

$$\psi(\mathbf{r}) = - \int \dots \int [v(r'_1) + v(r'_2) + w(r'_{12})] \phi(\mathbf{r}') G_{V^-}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') dv'_1 dv'_2,$$

где  $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$  — шестимерные векторы в пространстве конфигураций двух частиц. Выбираем  $k^2$  в функции Грина в соответствии с энергией связанного состояния  $\varepsilon$  (отрицательной, так что  $k$  мнимое), предполагая, что энергию мы определили достаточно точно [как, например, в равенстве (12.3.95)]. Подставляя приближенное выражение  $\phi$  в интеграл и выполняя интегрирование, получим улучшенное выражение для  $\phi$ .

Пробная волновая функция является функцией только от  $r$  и  $\alpha$  [см. равенства (12.3.88)] и не зависит от  $\vartheta_1, \vartheta_2, \varphi_1$  и  $\varphi_2$ . Так как функции  $v$  также зависят только от  $r$  и  $\alpha$ , то первые два члена интеграла содержат только тот член ряда (12.3.92), в котором  $l_1 = l_2 = m_1 = m_2 = 0$ . Так как

$$w(r_{12}) = \frac{q^2}{r_{12}} = \frac{q^2}{r} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos \vartheta_{12}) \begin{cases} \sec \alpha \operatorname{tg}^l \alpha, & 0 \leq \alpha \leq \frac{1}{4} \pi, \\ \operatorname{cosec} \alpha \operatorname{ctg}^l \alpha, & \frac{1}{4} \pi \leq \alpha \leq \frac{1}{2} \pi, \end{cases}$$

то третий член интеграла будет содержать только те члены, у которых  $l_1 = l_2, m_1 = m_2 = 0$ , т. е. члены, выписанные для  $G_{l=0}$ .

Члены интеграла, не зависящие от  $\vartheta_{12}$ , получить очень легко. Часть функции  $G$ , нужная здесь, имеет вид

$$G_0 = \frac{i}{8\pi^2 (rr')^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin [2(n+1)\alpha] \sin [2(n+1)\alpha']}{\sin \alpha \cos \alpha \sin \alpha' \cos \alpha'} \times \\ \begin{cases} J_{2n+2}(i\sqrt{2}\mu r') H_{2n+2}(i\sqrt{2}\mu r), & r > r', \\ H_{2n+2}(i\sqrt{2}\mu r') J_{2n+2}(i\sqrt{2}\mu r), & r < r', \end{cases}$$

где мы полагаем  $k^2 = \varepsilon = -2\mu^2 = -(1/2)q^4(Z - 5/16)^2$ , как и в равенстве (12.3.95). Функция  $v(r_1') + v(r_2')$  принимает вид  $-(q^2 Z/r')(\operatorname{cosec} \alpha' + \sec \alpha')$  и приближенная волновая функция равна

$$\frac{\mu^3}{\pi} e^{-\mu r'} (\sin \alpha' + \cos \alpha') = \frac{\mu^3}{\pi} e^{-\sqrt{2}\mu r' \cos \beta},$$

где  $\beta = \alpha' - \pi/4$ . Первый член ряда для  $\omega(r_{12})$ , также не зависящий от  $\vartheta_{12}$ , равен  $\left(\frac{q^2}{r}\right) \frac{\sec}{\operatorname{cosec}} \alpha$ , где секанс берется при  $0 < \alpha < \pi/4$ , а косеканс — при  $\pi/4 < \alpha < \pi/2$ .

Сопоставляя все эти множители и пользуясь полуцилиндрическими функциями, определенными в конце этой главы, мы получаем выражение для той части функции  $\psi$ , которая не зависит от  $\vartheta_{12}$  (т. е. используется только первый член  $\omega$ ):

$$\begin{aligned} & \frac{\mu^3 q^2}{2\pi r^2} \sum_n \frac{\sin [2(n+1)\alpha]}{\sin 2\alpha} \int_0^\infty \{ \} (r')^2 dr' \times \\ & \times \sqrt{2} \left\{ Z \int_{-\pi/4}^{\pi/4} \cos \left[ 2(n+1)\beta + \frac{n\pi}{2} \right] \cos \beta e^{-\sqrt{2}\mu r \cos \beta} d\beta - \right. \\ & \quad \left. - \int_0^{\pi/4} \cos \left[ 2(n+1)\beta + \frac{n\pi}{2} \right] (\cos \beta + \sin \beta) e^{-\sqrt{2}\mu r \cos \beta} d\beta \right\} = \\ & = \frac{q^2}{2r^2} \sum_m (-1)^m \frac{\sin [2(2m+1)\alpha]}{\sin 2\alpha} \left\{ H_{4n+2}(iz) \times \right. \\ & \quad \times \int_0^z J_{4n+2}(iz') \left[ \left( Z - \frac{1}{2} \right) \frac{d}{dz'} J_{4n+2}^{(4)}(iz') - \frac{1}{2} \frac{d}{dz'} E_{4n+2}^{(4)}(iz') \right] (z')^2 dz' + \\ & \quad + J_{4n+2}(iz) \int_0^\infty H_{4n+2}(iz') \left[ \left( Z - \frac{1}{2} \right) \frac{d}{dz'} J_{4n+2}^{(4)}(iz') - \right. \\ & \quad \quad \left. - \frac{1}{2} \frac{d}{dz'} E_{4n+2}^{(4)}(iz') \right] (z')^2 dz' \left. \right\}, \end{aligned}$$

где  $\{ \}$  в первом интеграле заменяет комбинации  $H_{2n+2}$  и  $J_{2n+2}$ , входящие в  $G$ , и где  $z = \sqrt{2}\mu r$ ,  $z' = \sqrt{2}\mu r'$ . Эта часть интеграла аналогична ряду (12.3.71); она не зависит от угла  $\vartheta_{12}$ ; следовательно, она немногим лучше пробной функции, с которой мы начали.

Однако несколько следующих членов разложения  $\omega$  дают некоторое улучшение. Интегралы подобны тем, которые выписаны для первого члена, а интегралы по  $r$  могут быть в случае необходимости выписаны явно, если воспользоваться интегральными представлениями функции Бесселя.

**Вариационные методы.** Во многих случаях, однако, чтобы улучшить выражение волновой функции, удобнее пользоваться вариационными методами. Если желают иметь волновую функцию для наинизшего состояния, в которой было бы принято во внимание взаимодействие между частицами, можно испытать функцию, принимающую малые значения при малом  $r_{12}$ , но не зависящую от  $r_{12}$ , когда  $r_{12}$  велико, такую, например, как

$$\varphi(\mu, \lambda) = e^{-\mu(r_1+r_2)} [1 - \lambda e^{-\mu r_{12}}]$$

с двумя параметрами  $\mu$  и  $\lambda$ . Эта функция не нормирована, так что интеграл для  $H$  нужно будет разделить на интеграл от квадрата  $\varphi$ .

Даже не прибегая к подробным расчетам, можно получить некоторые общие свойства интегралов, подлежащих варьированию. Например, заметив, что  $\mu$  является масштабным множителем, можно видеть, что

$$\begin{aligned} \int \dots \int \varphi^2 dv_1 dv_2 &= \mu^{-6} N(\lambda), \\ \int \dots \int \varphi (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \varphi dv_1 dv_2 &= -2\mu^{-4} T(\lambda), \\ \int \dots \int \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \varphi^2 dv_1 dv_2 &= 2\mu^{-5} V(\lambda), \\ \int \dots \int \frac{1}{r_{12}} \varphi^2 dv_1 dv_2 &= \mu^{-5} W(\lambda), \end{aligned}$$

где величины  $N$ ,  $T$ ,  $V$  и  $W$  не зависят от  $\mu$ . Мы можем теперь формально искать минимум энергии

$$H = 2\mu^2 \frac{T}{N} - 2\mu Z q^2 \frac{V}{N} + \mu q^2 \frac{W}{N}$$

относительно  $\mu$ . При  $\frac{\partial H}{\partial \mu} = 0$

$$\mu = \frac{1}{2} q^2 \left( Z \frac{V}{T} - \frac{1}{2} \frac{W}{T} \right), \quad \varepsilon(\lambda) = -\frac{1}{2} q^4 \frac{T}{N} \left( Z \frac{V}{T} - \frac{1}{2} \frac{W}{T} \right)^2, \quad (12.3.96)$$

что является очевидным обобщением выражения (12.3.95). Наилучшее значение  $\lambda$  и соответствующее наилучшее выражение энергии получаются при достижении функцией  $\varepsilon(\lambda)$  минимума. (Нужно, однако, заметить, что такое простое выполнение варьирования возможно только в том случае, когда все потенциальные энергии являются кулоновскими потенциалами, т. е. обратно пропорциональными расстояниям.)

Для расчета только что определенных интегралов более удобными координатами являются координаты Хиллерааса  $u = r_{12}$ ,  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_1 - r_2$ . Обычный элемент объема

$$dv_1 dv_2 = d\varphi_1 \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 r_1^2 dr_1 d\varphi_2 \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 r_2^2 dr_2$$

может быть видоизменен, если направление вектора  $\mathbf{r}_2$  отнести к вектору  $\mathbf{r}_1$  (см. рис. 12.9):

$$dv_1 dv_2 = d\varphi_1 \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 d\Psi \sin \vartheta_{12} d\vartheta_{12} r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2.$$

Если подинтегральные функции зависят только от  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_{12}$ , интегрирование по углам  $\varphi_1$ ,  $\vartheta_1$  и  $\Psi$  может быть выполнено и дает множитель  $8\pi^2$ , так что весь интеграл будет равен

$$\int \dots \int F(r_1, r_2, r_{12}) dv_1 dv_2 = \int \int \int F dv,$$

где

$$dv = 8\pi^2 \sin \vartheta_{12} d\vartheta_{12} r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2.$$

Так как

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \vartheta_{12}, \quad \text{то} \quad r_1 r_2 \sin \vartheta_{12} d\vartheta_{12} = r_{12} dr_{12},$$

а следовательно

$$dv = 8\pi^2 r_{12} r_1 r_2 dr_{12} dr_1 dr_2 = \pi^2 u (s^2 - t^2) du ds dt,$$

где  $u = r_{12}$ ,  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_1 - r_2$  и  $-u \leq t \leq u$ ,  $0 \leq u \leq s < \infty$ .

Если подинтегральное выражение  $F$  симметрично относительно  $t$ , то весь интеграл может быть записан следующим образом:

$$\int \dots \int F dv_1 dv_2 = 2\pi^2 \int_0^\infty ds \int_0^s u du \int_0^u (s^2 - t^2) F dt,$$

и, если положить  $\sigma = \mu s$ ,  $\tau = \mu t$  и  $\eta = \mu u$ , интегралы от потенциалов для пробной функции  $e^{-\sigma}(1 - \lambda e^{-\eta})$  будут равны

$$W(\lambda) = 2\pi^2 \int_0^\infty e^{-2\sigma} d\sigma \int_0^\sigma (1 - 2\lambda e^{-\eta} + \lambda^2 e^{-2\eta}) d\eta \int_0^\eta (\sigma^2 - \tau^2) d\tau,$$

$$V(\lambda) = 4\pi^2 \int_0^\infty \sigma e^{-2\sigma} d\sigma \int_0^\sigma \eta (1 - 2\lambda e^{-\eta} + \lambda^2 e^{-2\eta}) d\eta \int_0^\eta d\tau.$$

Интеграл кинетической энергии более сложен. Мы предпочитаем перейти от интеграла, содержащего лапласианы, к интегралу от квадратов градиентов  $\varphi$ . Применяя формулы

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial r_1} \frac{x_1}{r_1} + \frac{\partial f}{\partial r_{12}} \frac{x_1 - x_2}{r_{12}}, \quad \frac{\partial f}{\partial r_1} = \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{\partial f}{\partial t} \text{ и т. д.},$$

можно убедиться в том, что

$$(\nabla_1 \varphi)^2 + (\nabla_2 \varphi)^2 = 2 \left( \frac{\partial \varphi}{\partial s} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial \varphi}{\partial u} \right)^2 + \\ + \frac{4}{u(s^2 - t^2)} \frac{\partial \varphi}{\partial u} \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \varphi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right],$$

если  $\varphi$  зависит только от  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_{12}$ . Таким образом, для выбранной пробной функции

$$T = -\frac{1}{2} \mu^4 \int \dots \int \varphi (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \varphi dv_1 dv_2 = \\ = \frac{1}{2} \mu^4 \int \dots \int [(\nabla_1 \varphi)^2 + (\nabla_2 \varphi)^2] dv_1 dv_2 = \\ = 2\pi^2 \int_0^\infty e^{-2\sigma} d\sigma \int_0^\sigma \eta d\eta \int_0^\eta (\sigma^2 - \tau^2) \left[ (1 - \lambda e^{-\eta})^2 + \right. \\ \left. + \lambda^2 e^{-2\eta} + \frac{2\lambda\tau}{\eta} \frac{\eta^2 - \tau^2}{\sigma^2 - \tau^2} (1 - \lambda e^{-\eta}) e^{-\eta} \right] d\tau.$$

Подставив эти интегралы в (12.3.96), можно получить более точное значение  $z$ . Применяя несколько более гибкую пробную функцию, зависящую от большего числа параметров, можно подойти как угодно близко к истинному результату.

**Рассеяние электронов на атоме водорода.** Как пример другого использования многомерной функции Грина укажем процесс расчета результатов столкновения между электроном и атомом водорода ( $Z = 1$ , один связанный электрон, один свободный; мы пренебрегаем спином электрона и эффектом симметрии, как мы это делали до сих пор). Интегральное уравнение системы имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = q^2 \int \dots \int \left( \frac{1}{r_1'} + \frac{1}{r_2'} - \frac{1}{r_{12}'} \right) \psi(\mathbf{r}') G_R(\mathbf{r} | \mathbf{r}') dv_1' dv_2',$$

где для функции Грина мы применяем ее представление через интеграл Фурье (12.3.94) и где, как и раньше,  $q^2 = 2Me^2/\hbar^2$ .

Изучаемое состояние является состоянием, в котором частица 1, первоначально свободная, движется к началу координат с кинетической энергией  $k_1^2$ , а частица 2 связана в наименьшем состоянии с энергией  $-q^4/4$ . Часть соответствующей волновой функции дает «поверхностную» волну (см. стр. 661), близко примыкающую к гиперповерхности  $r_2 = 0$ . Однако здесь имеются и «отраженные» волны, вызванные потенциалом взаимодей-

ствия; некоторые из них будут также поверхностными волнами, что соответствует тому, что та или другая частица осталась в связанном состоянии, но, если  $k_1^2 - q^4/4$  положительно, здесь будет также некоторое количество «свободных» волн, соответствующих случаю, когда обе частицы покидают притягивающий центр.

Первое приближение к решению интегрального уравнения может быть получено, если вместо  $\psi$  под знак интеграла подставить «поверхностную» волну, соответствующую первоначальному состоянию. [Это эквивалентно приближению Борна для одной частицы, см. равенство (12.3.58) и следующие.] Полагаем

$$\psi^i \approx e^{ik_1 z_1} \frac{q^3}{V 8\pi} e^{-q^2 r_2/2} = e^{ik_1 z_1} \varphi_{001}(r_2)$$

[здесь  $\varphi_{001}$  является наименьшей из собственных функций  $\psi_{mln}$ , данных в равенстве (12.3.40)] и применяем интегральное уравнение для подсчета следующего приближения. Непосредственно выясняется один полезный факт: если бы в квадратных скобках в интегральном уравнении стоял единственный член  $1/r_2$ , то  $\psi^i$  было бы точным решением интегрального уравнения. Следовательно, интеграл от произведения  $\psi^i G$  на  $q^2/r_2$  должен быть равен  $\psi^i$  и

$$\psi \simeq \psi^i + q^2 \int \dots \int \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) e^{ik_1 z_1'} \varphi_{001}(r'_2) G_k(\mathbf{r}|\mathbf{r}') dv'_1 dv'_2, \quad (12.3.97)$$

где  $k^2 = k_1^2 - q^4/4$ . Функция Грина  $G$  имеет амплитуду, отличную от нуля, если  $r_1$  велико или  $r_2$  велико, что соответствует тому факту, что или частица 1 или частица 2 может удаляться от начала координат после столкновения. Чтобы подробнее видеть, что здесь происходит, мы должны преобразовать это уравнение в более наглядные формы. Например, мы можем интересоваться поведением частицы 1, когда она отскакивает от центра сил, оставляя частицу 2 в связанном состоянии (не обязательно в наименьшем). В этом случае удобно разложить интеграл в ряд по собственным функциям для частицы 2, умноженным на функции от  $r_1$ ,

$$\psi \simeq \psi^i + \sum_{nlm} \varphi_{mln}(\mathbf{r}_2) f_{mln}(\mathbf{r}_1), \quad (12.3.98)$$

$$f_{mln}(\mathbf{r}_1) = q^2 \int \int \int \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}_2) dv_2 \int \dots \int \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) \times \\ \times e^{ik_1 z_1'} \varphi_{001}(r'_2) G_k(\mathbf{r}|\mathbf{r}') dv'_1 dv'_2.$$

Функции  $f_{mln}$  определяют, таким образом, поведение частицы 1 в том случае, когда частица 2 остается в состоянии  $mln$ . В этой сумме, конечно, встречаются и волновые функции свободных состояний частицы 2, так как здесь содержится полный комплект функций  $\varphi$ , но в силу сохранения энергии для некоторых из них частица 1 не будет свободной. Это, однако, не должно нас смущать; мы представили разложение в этой форме специально для того, чтобы рассчитать поведение частицы 1, когда частица 2 остается связанной, поэтому мы должны сосредоточиться на коэффициентах при наименьших членах ряда, а для выяснения других фактов придется воспользоваться другими типами разложений.

Подставляя в равенство для  $f$  выражение  $G$  через интеграл Фурье, получим

$$f_{mln}(\mathbf{r}_1) = \frac{q^2}{64\pi^6} \int \dots \int \frac{e^{i\xi_1(x_1-x_1') + \dots + i\xi_2(z_2-z_2')} -}{\xi_1^2 + \dots + \xi_2^2 - k_1^2 + \frac{1}{4} q^4} \varphi_{mln}(\mathbf{r}_2) \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) \times \\ \times e^{ik_1 z_1'} \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) dv_2 dv'_1 dv'_2 d\xi_1 \dots d\xi_2.$$

Интегрирование по  $dv_2$  может быть легко выполнено. В результате получаем преобразование Фурье функции  $\bar{\varphi}_{mln}$ , т. е. функцию  $\bar{\chi}_{mln}$ , определенную равенством (12.3.54). Это — функция от компонент  $\xi_2, \eta_2, \zeta_2$  волнового вектора  $\mathbf{x}_2$  с полюсами в точках  $\mathbf{x}_2 = \pm i(q^2/2n)$ , соответствующих энергии  $\varepsilon = -(q^4/4n^2)$  для  $n$ -го связанного состояния частицы 2.

Интегрирование по  $\xi_2, \eta_2, \zeta_2$  не так просто. Если бы не было знаменателя  $\xi_1^2 + \dots + \zeta_2^2 - k_1^2 + q^4/4$ , мы получили бы в итоге опять  $\bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}'_2)$ , умноженное на  $8\pi^3$ , так как интегрирование по  $dv_2$ , а также по  $d\xi_2 d\eta_2 d\zeta_2$  привело бы просто к интегральной теореме Фурье. С другой стороны, интеграл по пространству  $\mathbf{x}_2$  может быть приведен к контурным интегралам вокруг полюсов функции  $\bar{\chi}$  и множителя  $(x_1^2 + x_2^2 - k_1^2 + q^4/4)^{-1}$ . Вычеты относительно полюсов функции  $\bar{\chi}$  пропорциональны функции  $\bar{\varphi}_{mln}$  — преобразованию Фурье функции  $\bar{\chi}$ . Вычеты относительно полюсов другого множителя соответствуют искажению волновой функции частицы 2, вызванному присутствием частицы 1, и они становятся малыми при достаточном больших значениях  $r_1$ . Здесь мы пренебрегаем этими членами.

**Упругое и неупругое рассеяние.** Рассматривая вычеты относительно полюсов функции  $\bar{\chi}$  и пользуясь (11.2.5), имеем

$$\begin{aligned} f_{mln}(\mathbf{r}_1) &\simeq \frac{q^2}{8\pi^3} \int \dots \int \frac{e^{i\mathbf{k}_1(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) + i\eta_1(y_1 - y'_1) + i\zeta_1(z_1 - z'_1)}}{\xi_1^2 + \eta_1^2 + \zeta_1^2 - k_1^2 + \frac{1}{4}q^4 [1 - (1/n^2)]} e^{i\mathbf{k}'_1 \mathbf{x}} \\ &\quad \times \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}'_2) \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) dv'_1 dv'_2 d\xi_1 d\eta_1 d\zeta_1 \simeq \\ &\simeq q^2 \int \dots \int \frac{e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{R}_1}}{4\pi R_1} \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}'_2) \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) e^{i\mathbf{k}'_1 \mathbf{z}'_1} dv'_1 dv'_2 \simeq \\ &\simeq \frac{q^2}{4\pi r_1} e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{r}_1} \int \dots \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_n) \cdot \mathbf{r}'_1} \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}'_2) \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) dv'_1 dv'_2, \quad r_1 \rightarrow \infty, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{k}_i = k_1 \mathbf{a}_z$  — вектор, равный произведению  $M/\hbar$  на скорость падающей частицы 1, а  $\mathbf{k}_n$  пропорционален скорости частицы 1, если после соударения атом оказывается в состоянии  $n$ . Направление  $\mathbf{k}_n$  образует с осью  $z_1$  угол рассеяния  $\vartheta_1$ , а величина  $\mathbf{k}_n$  выражается через  $k_1$  и энергии начального и конечного связанных состояний —  $q^4/4$  и  $-q^4/4n^2$  с помощью равенства

$$k_n^2 = k_1^2 - \frac{1}{4}q^4 \left( 1 - \frac{1}{n^2} \right).$$

Заметим, что вектор  $\mathbf{k}_1$ , соответствующий случаю, когда состояние атома не изменяется (упругое рассеяние), имеет ту же величину  $k_1$ , что и вектор  $\mathbf{k}_i$ , но иное направление. Отметим также, что для всех состояний, кроме начального, интеграл, содержащий  $1/r'_1$ , равен нулю из-за ортогональности собственных функций  $\varphi$ .

Интегрирование по  $dv'_2$  приводит к функции от  $\mathbf{r}'_1$ , которая представляет собою разность поля ядра и поля плотности заряда  $|\varphi_{001}|^2$  (для нижнего  $f$ ) или поля «обменной плотности заряда»  $\bar{\varphi}_{mln} \varphi_{001}$  для  $f_{mln}$ . Следовательно, можно сказать, что вероятность того, что частица 1 упруго рассеяна системой, состоящей из частицы 2 и ядра, равна преобразованию Фурье потенциального поля системы для частицы 1, составленного для волнового вектора  $(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_i)$ , соответствующего изменению импульса частицы 1, вызванному столкновением. Аналогично вероятность неупругого рассеяния, при котором частица 2 оказывается в состоянии  $mln$ , равна преобразованию Фурье потенциала частицы 1, порожденного обменной плотностью заряда  $\bar{\varphi}_{mln} \varphi_{001}$ , для волнового вектора  $(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_i)$ , пропорционального изме-



нению импульса, произошедшему в результате неупругого столкновения. Величину этого волнового вектора можно обозначить через  $\mu_n$ , где

$$\mu_n^2 = |\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_i|^2 = k_1^2 + k_n^2 - 2k_1 k_n \cos \vartheta_1 \simeq \left(2k_1 \sin \frac{\vartheta_1}{2}\right)^2, \quad k_1^2 \gg \frac{q^4}{4}, \quad \vartheta_1 \gg 1 - \frac{k_n}{k_1}.$$

Для того чтобы рассчитать упругое и неупругое рассеяние частицы 1, можно воспользоваться аппаратом приближения Борна [см. равенства (12.3.59) и (12.3.60)]. Для упругого рассеяния потенциал, вызывающий рассеяние, является разностью между потенциалом ядра и потенциалом плотности заряда  $\rho(r) = |\varphi_{001}(r)|^2$ ; для неупругого рассеяния (для состояния  $mln$ ) потенциал является потенциалом обменной плотности заряда  $\varphi_{mln}\varphi_{001}$  [здесь равенства (12.3.59) и (12.3.60) должны быть видоизменены, так как  $\rho$ , а следовательно, и  $V$  не являются сферически симметричными].

Если  $k_1^2$  очень велико по сравнению с величиной энергии связи  $q^4/4$ , мы можем получить несколько упрощенную формулу, интегрируя сначала по  $dv'_1$  и пользуясь равенством

$$\frac{1}{4\pi} \iiint e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'_1} \frac{1}{r'_{12}} dv'_1 = \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'_2},$$

полученным с помощью преобразования Фурье. Имеем

$$f_{mln} \simeq \frac{q^2}{\mu^2 r_1} e^{i\mu r_1} \iiint (1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'_2}) \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}'_2) \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) dv'_2, \quad k_1 \rightarrow \infty,$$

где  $\mu = |\mathbf{k}| \simeq 2k_1 \sin\left(\frac{1}{2}\vartheta_1\right)$ , что пригодно всегда, если угол рассеяния  $\vartheta_1$  не слишком мал. Так как при  $k_1 \gg q^2/4$  импульс частиц, рассеянных неупруго, немногим меньше импульса упруго-рассеянных частиц, то мы здесь интересуемся *полным* рассеянным потоком для частицы 1, учитывая упругое и неупругое рассеяние. Выражение для него мы можем получить, суммируя квадраты абсолютных величин всех членов ряда (12.3.98):

$$S(\vartheta_1) \simeq r_1^2 \sum_{nlm} |f_{mln}|^2,$$

где  $S$  — полный рассеянный поток для частицы 1 на единицу телесного угла для угла рассеяния  $\vartheta_1$  и на единицу плотности падающего потока.

Из полноты системы собственных функций следует, что для суммы, распространенной на все возможные состояния, имеет место равенство

$$\sum_{mln} \left| \iiint \bar{\varphi}_{mln} G \varphi_{001} dv \right|^2 = \iiint \bar{\varphi}_{001} |G|^2 \varphi_{001} dv,$$

которое называется *правилом матричных сумм*. Следовательно,

$$S(\vartheta_1) \simeq 2 \frac{q^4}{\mu^4} \iiint \bar{\varphi}_{001} (1 - \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'_2)) \varphi_{001} dv \simeq 2 \frac{q^4}{\mu^4} [F(0) - F(\mu)],$$

где  $F$  — *структурный фактор* для состояния 001, определенный в (12.3.60). Сравнивая равенство (12.3.60) с только что выведенным, мы видим, что поток упруго-рассеянных частиц равен  $(q^4/\mu^4) [F(0) - F(\mu)]^2$ , в то время как полный рассеянный поток (упругий и неупругий) равен  $2(q^4/\mu^4) [F(0) - F(\mu)]$ , если импульс падающей частицы достаточно велик (если атом-мишень имеет более одной частицы, то последняя формула несколько видоизменяется).

**Обмен частиц.** Рассмотрев различные возможности для случая отскокивания частицы 1 от атома, мы должны рассмотреть теперь вероятность того, что частицы обмениваются местами; частица 2 удаляется, а частица 1

остается. (Это соответствует отражению от оси  $\xi$  в простом примере стр. 657.) Здесь более удобны разложения по собственным функциям частицы 1. Вместо равенства (12.3.98) мы пишем

$$\psi \simeq \psi^i + \sum_{mln} \varphi_{mln}(\mathbf{r}_1) g_{mln}(\mathbf{r}_2), \quad (12.3.99)$$

$$g_{mln} = q^2 \int \int \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}_1) dv_1 \int \dots \int \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) e^{ik_1 r'_1} \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) G_h(\mathbf{r} | \mathbf{r}') dv'_1 dv'_2.$$

Этот ряд полностью дублирует ряд (12.3.98), и мы подвергаемся опасности некоторых повторений, если будем учитывать все функции  $g$  так же, как и все функции  $f$ . Однако, если мы рассматриваем только те функции  $f$ , для которых  $\varphi_{mln}(\mathbf{r}_1)$  представляет связанное состояние, то первая совокупность соответствует связанной частице 2, а вторая — связанной частице 1 и дублирования не будет. (Здесь могут быть, *кроме того*, некоторые состояния, в которых ни одна частица не будет связанной; мы их рассмотрим позже.)

Применяя к этому интегралу те же приближенные приемы, которые мы применяли для функций  $f_{mln}$ , найдем, что

$$g_{mln}(\mathbf{r}_1) \simeq \frac{q^2}{4\pi r_2} e^{ik_n r_2} \int \dots \int e^{ik_1 \cdot \mathbf{r}_1 - ik_n \cdot \mathbf{r}_2} \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) \times \\ \times \bar{\varphi}_{mln}(\mathbf{r}'_1) \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) dv'_1 dv'_2, \quad r_2 \rightarrow \infty;$$

это соотношение может быть использовано в различных частных случаях, подобно аналогичным соотношениям для функций  $f$ .

Если кинетическая энергия  $k_1^2$  падающей частицы меньше энергии связи  $q^4/4$  первоначального состояния, то обе частицы не могут быть одновременно свободными, и если измеряются только те частицы, которые покидают атом, то для большого  $r_1$  или  $r_2$  ( $r$  велико) можно написать

$$\psi \simeq \psi^i + \sum \varphi_{mln}(\mathbf{r}_2) f_{mln}(\mathbf{r}_1) + \sum \varphi_{mln}(\mathbf{r}_1) g_{mln}(\mathbf{r}_2).$$

Обе суммы распространены только на те состояния, для которых  $k_n^2 = k_1^2 - (1/4)q^4(1 - 1/n^2)$  положительно. Мы пренебрегаем здесь возможными состояниями, в которых обе частицы связаны (отрицательный ион). Эти состояния входят в интеграл для  $\psi$ , но исчезают, когда  $r$  становится большим.

Наконец, если  $k_1^2$  больше чем  $q^4/4$ , то обе частицы могут быть свободными. Чтобы рассчитать вероятность этого, вернемся к равенству (12.3.97) и исследуем поведение интеграла при больших значениях  $r$ , когда  $\alpha$  отлочно от 0 и  $\pi/2$  (оба  $r_1$  и  $r_2$  велики). Чтобы провести это исследование, легче всего воспользоваться функцией Грина в форме (12.3.91). При большом  $r$  и малом  $r'$  можно написать

$$R \simeq r^2 - r'_1 \cos \alpha \cos \theta_1 - r'_2 \sin \alpha \cos \theta_2, \\ \cos \theta_j = \cos \vartheta_j \cos \vartheta'_j + \sin \vartheta_j \sin \vartheta'_j \cos(\varphi_j - \varphi'_j).$$

Если мы обозначим волновой вектор частицы 1 через  $\mathbf{K}_1$  и волновой вектор частицы 2 через  $\mathbf{K}_2$  и предположим, что их величины равны соответственно  $k \cos \alpha$  и  $k \sin \alpha$  ( $k^2 = k_1^2 - q^4/4$ ), а направлены они соответственно под углами  $\vartheta_1$  и  $\vartheta_2$  к оси  $z$  (под углами  $\theta_1$  и  $\theta_2$  соответственно к направлениям  $\mathbf{r}'_1$  и  $\mathbf{r}'_2$ ), то

$$G_h(\mathbf{r} | \mathbf{r}') \simeq \frac{1}{2} \frac{ik^4}{(2\pi ikr)^{5/2}} e^{ikr - i\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{r}'_1 - i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}'_2},$$

и для части волновой функции при больших значениях  $r_1$  и  $r_2$  можно написать

$$\psi \simeq \psi^i + r^{-5/2} e^{ikr} \Omega(k, \alpha, \vartheta_1, \vartheta_2), \quad (12.3.100)$$

$$\begin{aligned} \Omega &= \sqrt{\frac{k^3 q^4}{2^7 \pi^5 i^3}} \int \dots \int \left( \frac{1}{r'_1} - \frac{1}{r'_{12}} \right) e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{K}_1) \cdot \mathbf{r}'_1 - i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}'_2} \varphi_{001}(\mathbf{r}'_1) dv'_1 dv'_2 = \\ &= \left( \frac{k}{2\pi i} \right)^{3/2} \frac{q^2}{\sqrt{2}} \iiint [1 - e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{K}_1) \cdot \mathbf{r}'_2}] e^{-i\mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}'_2} \varphi_{001}(\mathbf{r}'_2) dv'_2, \end{aligned}$$

где

$$\nu = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{K}_1| = \sqrt{k_1^2 + k^2 \cos^2 \alpha - 2k_1 k \cos \alpha \cos \vartheta_1}$$

и

$$|\mathbf{K}_1| = k \cos \alpha, \quad |\mathbf{K}_2| = k \sin \alpha, \quad k^2 = k_1^2 - \frac{1}{4} q^4.$$

Эта часть волновой функции выражена в гиперсферических координатах и для получения полной интенсивности  $|\Omega|^2$  следует проинтегрировать, умножив на элемент поверхности  $r^5 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha da \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 d\varphi_1 \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 d\varphi_2$ . Эта функция дает амплитуду волны в направлениях, определяемых углами  $\vartheta_1$  и  $\vartheta_2$ , для энергии, определенной углом  $\alpha$ . Если  $k_1^2$  меньше чем  $q^4/4$ , то  $k$  мнимое, и волнового движения этого типа не будет.

Окончательный результат совершенно аналогичен результату для случая двух измерений, рассмотренному на стр. 664. Посылается поверхностная волна  $\psi^i$  и появляется некоторое количество поверхностных волн с амплитудами  $|f_{mln}|$ , примыкающих к поверхности  $r_2 = 0$  (частица 2 связана); кроме того, существуют другие поверхностные волны с амплитудами  $|g_{mln}|$ , примыкающие к поверхности  $r_1 = 0$  (частица 1 связана); и, наконец, если  $k_1^2$  достаточно велико, существует свободная волна (обе частицы свободны) с непрерывным распределением избытка энергии между двумя частицами (угол  $\alpha$ ) с соответствующей амплитудой  $|\Omega|$ . (Заметим, что эта амплитуда равна нулю при  $\alpha = 0$  или  $\pi/2$ ; волны в этих направлениях являются поверхностными волнами, скорее с волновым числом  $k_n$ , чем с волновым числом  $k$ .) Собирая члены, мы видим, что часть  $\psi$ , остающаяся конечной при большом  $r$  ( $r_1$  или  $r_2$  или оба они велики), имеет вид

$$\begin{aligned} \psi &\simeq e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1} \varphi_{001}(\mathbf{r}_2) + \sum_{mln} \varphi_{mln}(\mathbf{r}_2) f_{mln}(\mathbf{r}_1) + \\ &+ \sum_{mln} \varphi_{mln}(\mathbf{r}_1) g_{mln}(\mathbf{r}_2) + r^{-5/2} e^{ikr} \Omega(k, \alpha, \vartheta_1, \vartheta_2), \quad (12.3.101) \end{aligned}$$

где суммирование по  $mln$  распространяется на все связанные состояния, для которых  $k_1^2 - (1/4)q^4(1 - 1/n^2)$  положительно, и где член, содержащий  $\Omega$ , входит только тогда, когда  $k_1^2 > q^4/4$  (в последнем случае в суммы входят все связанные состояния).

Эта формула является, конечно, только приближенной. Точное решение должно иметь асимптотически тот же вид, что и данное, но значения функций  $f$ ,  $g$  и  $\Omega$  должны быть несколько иными. Область применимости приближения может быть определена тем же способом, который разобран на стр. 638. Вообще формулы пригодны для высоких кинетических энергий падающих частиц и становятся менее точными для медленных падающих частиц. Здесь нет удовлетворительного решения для неупругих столкновений (и обмена) при очень малых скоростях падающих частиц (например, при энергиях, чуть-чуть больших энергии возбуждения).

**Заключение.** Мы заканчиваем параграф, посвященный волновой механике. Здесь не могли быть упомянуты важные вопросы, связанные со спином частиц или с принципом запрета Паули, а также и другой существенный материал. Эти вопросы рассматриваются во многих других книгах, специально посвященных квантовой теории; наша же книга имеет дело прежде всего с аналитическими приемами решения задач теории поля, а не с физическим истолкованием уравнений. Мы уже касались большинства приемов, используемых в квантовой механике: определения связанных и свободных состояний, применения теории возмущений, вариационных методов и применения интегральных уравнений в связи с приближением Борна. Были рассмотрены трудности, возникающие в проблеме нескольких частиц, в объеме достаточном для того, чтобы показать сложность этой проблемы; были указаны некоторые приемы, применяемые для преодоления этих трудностей. Дальнейшее рассмотрение этих вопросов завело бы нас слишком далеко от нашей основной задачи. Мы должны перейти к нашему последнему важному вопросу, к вычислению чисто векторных полей.

## Задачи к главе 12

12.1. Проволока радиуса  $R$  помещена в среду, температура которой колеблется по закону  $T = T_0 + \Delta T e^{-i\omega t}$ . Сопротивление материала проволоки при температуре, близкой к  $T_0$ , равно  $\rho = \rho_0 + \rho_1(T - T_0)$ . Вычислить сопротивление единицы длины проволоки как функцию времени. Вычислить сопротивление как функцию времени, если температура при  $r = R$  равна  $T_0 + \Delta T u(t)$ .

12.2. Найти ряд, выражающий поток тепла, идущий внутрь параллелепипеда задачи 10.1, как функцию времени, если нагреватель включается при  $t = 0$  и его температура равна  $T_0 u(t)$ .

12.3. Если ускоренный ион ударяется о металлическую поверхность, то он отдает свою кинетическую энергию  $eV_0$  малой области поверхности металла. Температура металла в точке  $(x, y, z)$  по прошествии времени  $t$  после столкновения дается приближенно функцией Грина

$$T = \frac{A}{t^{3/2}} \exp\left(-\frac{a^2(x^2 + y^2 + z^2)}{4t}\right) u(t) u(x),$$

где  $a$  — постоянная диффузии металла,  $x = y = z = 0$  в точке удара иона, область  $x \geq 0$  заполнена металлом, область  $x \leq 0$  является свободным пространством, а  $A$  подобрана так, чтобы интеграл от дополнительной тепловой энергии  $\rho C T$ , распространенный по металлу, был равен  $eV_0$ . Скорость улетучивания металла с его поверхности  $x = 0$  в зависимости от температуры на его поверхности  $T_s$  равна

$$J_e = B \exp\left(-\frac{E_0}{kT_s}\right),$$

где  $E_0$  — средняя энергия, необходимая для выбивания атома металла с поверхности. Подсчитать полное количество металла, улетучившегося с поверхности (разбрызганного с нее), вследствие удара одного иона, выразив это количество как функцию от  $B$ ,  $E_0$ ,  $V_0$  и тепловых свойств металла.

12.4. В жидком гелии II связь между потоком тепла  $\mathbf{J}$  калорий в секунду на квадратный сантиметр и относительной температурой  $\tau$  состоит не в том, что  $\mathbf{J}$  пропорционален градиенту  $\tau$ , а в том, что производная  $\partial \mathbf{J} / \partial t$