

Государственный университет «Дубна»
Инженерно-физический институт
Кафедра ядерной физики
Кафедра фундаментальных проблем физики микромира

Специальный семинар по физике ядра и ядерным реакциям

В.В.Самарин

**Угловой момент, центральное поле,
атомы водорода и гелия**

Вопросы 7, 8, 9, 10, 11.

Вопрос 7

- Угловой момент
- Движение в центральном поле.
- Атом водорода: волновые функции и уровни энергии

Угловой момент

Оператор момента импульса

$$\hat{M} = \begin{bmatrix} \hat{r} & \hat{p} \\ \hat{r} & \hat{p} \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} \hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z \\ x & y & z \\ -i\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} & -i\hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} & -i\hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} =$$

$$= \hat{e}_x \left(-i\hat{e}_y \frac{\partial}{\partial z} + i\hat{e}_z \frac{\partial}{\partial y} \right) - \hat{e}_y \left(-i\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial z} + i\hat{e}_z \frac{\partial}{\partial x} \right) + \hat{e}_z \left(-i\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial y} + i\hat{e}_y \frac{\partial}{\partial x} \right) =$$

$$= \hat{e}_x \hat{M}_x + \hat{e}_y \hat{M}_y + \hat{e}_z \hat{M}_z = \hat{e}_x \hat{L}_x + \hat{e}_y \hat{L}_y + \hat{e}_z \hat{L}_z$$

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2, \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\Delta_{\theta, \varphi} = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right], \hat{L}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta, \varphi}$$

Собственные значения операторов квадрата и проекции момента импульса, квадрата орбитального момента и проекции орбитального момента

$$\hat{M}^2 Y_{lm} = \hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm}; \hat{M}_z Y_{lm} = \hat{L}_z Y_{lm} = m_l Y_{lm}$$

$$l=0,1,2,\dots; m_l=0,\pm 1, \pm 2,\dots,\pm l$$

Сферические гармоники и полиномы Лежандра: пример расчета в Maple

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta). \quad (5.16)$$

В программе Maple есть возможность получать явный вид полиномов Лежандра и строить угловые диаграммы для плотности вероятности $|Y_{l0}(\theta)|^2$ (см. рис. Пб.2).

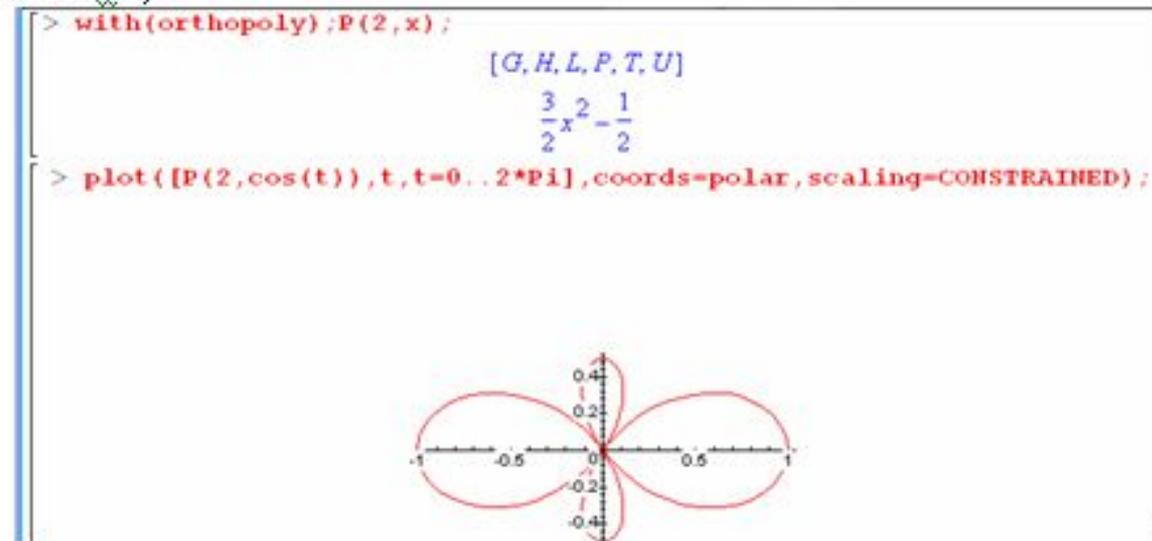


Рис. Пб.2. Построение угловой диаграммы для плотности вероятности $|Y_{20}(\theta)|^2$ с помощью программы Maple

Сферические гармоники и присоединенные функции Лежандра

Для сферических (шаровых) функций (сферических гармоник) используют определение, согласно [1, т.3] (некоторые авторы определение записывают без множителей i^l)

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (-1)^m i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^{(m)}(\cos\theta) e^{im\varphi}, m \geq 0, \rightarrow (1.36) \quad P_l^{(m)}(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

$$Y_{l,-m}(\theta, \varphi) = i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^{(m)}(\cos\theta) e^{-im\varphi}, -m < 0, \rightarrow (1.37)$$

Здесь θ, φ углы в сферической системе координат. Они удовлетворяют уравнению

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) + l(l+1)Y_{l,m}(\theta, \varphi) = 0,$$

$$\Delta_{\theta, \varphi} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

Сферические гармоники и гипергеометрическая функция

Гипергеометрическая функция определяется внутри круга $|z| < 1$ рядом

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots, \quad (e,1)$$

а при $|z| > 1$ получается аналитическим продолжением этого ряда (см. (e,6)). Гипергеометрическая функция является одним из частных интегралов дифференциального уравнения

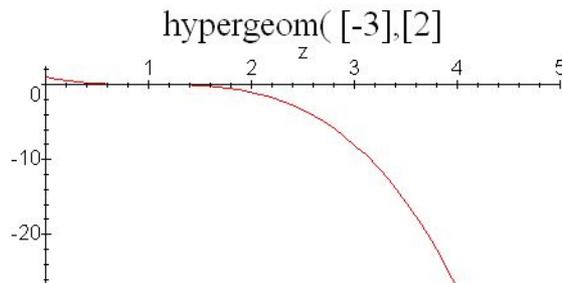
$$z(1-z)u'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z]u' - \alpha\beta u = 0. \quad (e,2)$$

Параметры α и β произвольны, а $\gamma \neq 0, -1, -2, \dots$. Функция $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$, очевидно, симметрична по параметрам α и β).

5.2.4. $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ and the Hypergeometric Functions with Arguments Expressed in Terms of Trigonometric Functions of $\vartheta/2$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \xi_{m0} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \frac{(\sin \vartheta)^{|m|}}{|m|!2^{|m|}}} F\left(-l+|m|, l+|m|+1; |m|+1; \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right), \quad \xi_{m0} = \begin{cases} (-1)^m & \text{if } m > 0, \\ 1 & \text{if } m \leq 0, \end{cases}$$

```
> readlib(hypergeom) :
  hypergeom([-2,1],[2],z);
>
  hypergeom([-2,1],[2],z)
> plot(hypergeom([-3,2],[2],z),z=0..5,title='hypergeom([-3],[2]`);
>
```

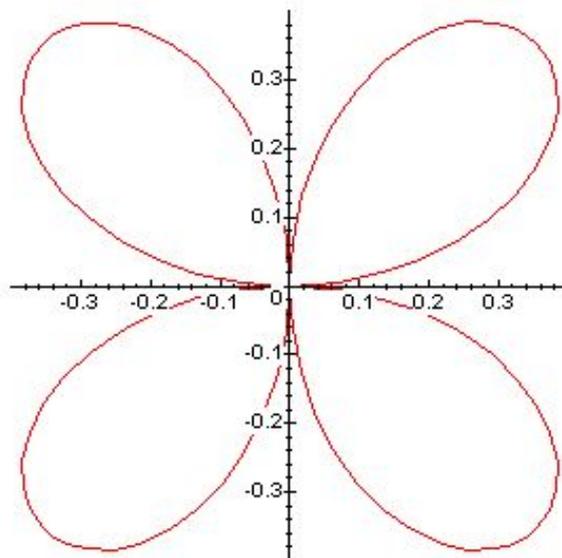


Сферические гармоники: пример расчета в Maple

5.2.4. $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ and the Hypergeometric Functions with Arguments Expressed in Terms of Trigonometric Functions of $\vartheta/2$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \xi_{m0} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \cdot \frac{(\sin \vartheta)^{|m|}}{|m|!2^{|m|}}} F\left(-l+|m|, l+|m|+1; |m|+1; \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right),$$

```
> readlib(hypergeom):  
> L:=2;m:=-1;f:=(te)->hypergeom([-L+m,L+m+1],[m+1],(sin(te/2))^2)*(sin(te))^m;  
L:=2  
m:=1  
f:=te -> hypergeom([-L+m,L+m+1],[m+1],sin(1/2*te)^2)sin(te)^m  
> plot(abs(f(te)),te=0..2*Pi,coords=polar,scaling=CONSTRAINED);
```



Движение в центральном поле

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(r))\psi = 0 \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + k\frac{e^2}{r}\right)\psi = 0. \quad \text{для атома H}$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Здесь r, θ, φ – сферические координаты, l – орбитальное квантовое число
 $m = m_l$ – магнитное орбитальное квантовое число,

$$m = m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l.$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta).$$

Радialные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера.

Атом водорода: уровни энергии и спектр излучения

$$E_n = -\frac{hcR_H}{n^2} \text{ или } E_n \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ эВ.}$$

Решение уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (5.13)$$

дает для состояний электрона в атоме водорода те же энергии (5.3), (5.6), что и модель Бора, Формула Бальмера для длин волн в видимой и ближней ультрафиолетовой части спектра

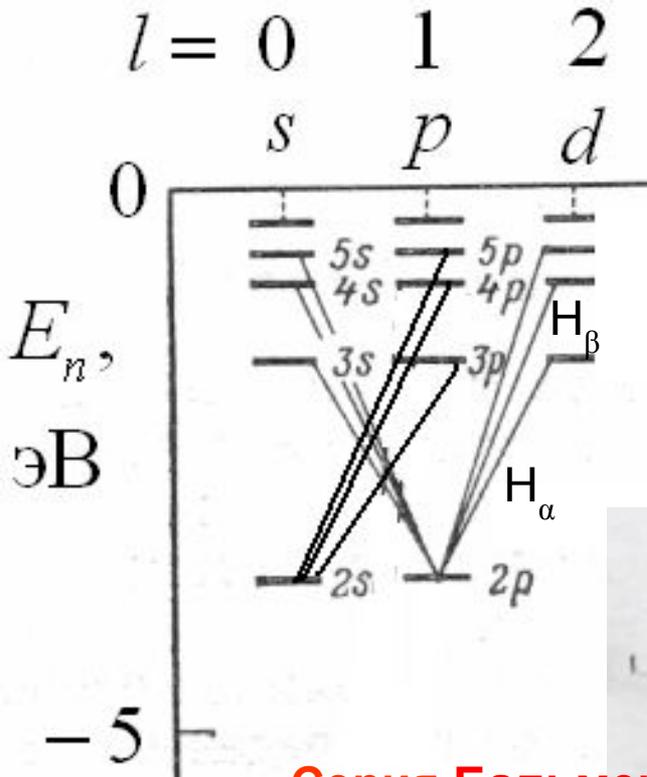
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n_1 = 2$$

постоянная Ридберга

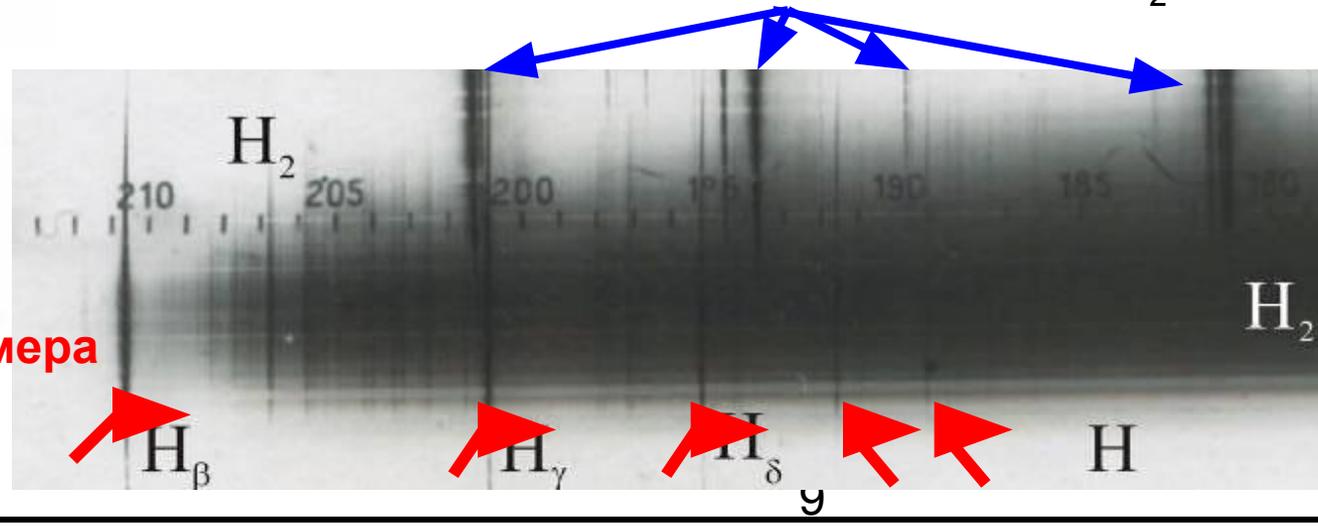
приведенная масса электрона и протона

$$R_H = \frac{\mu e^4}{8ch^3 \epsilon_0^2}$$

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} \approx m_e$$



Спектры излучения атомов **H**, **Hg** и молекулы **H₂**



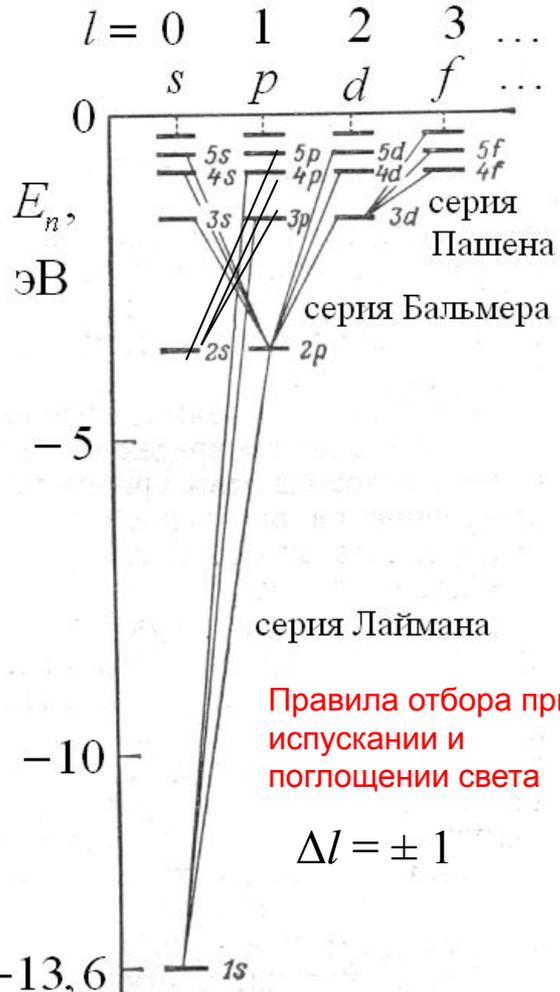
Серия Бальмера

Атом водорода: спектральные серии, уровни энергии и волновые функции

$$E(n) = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{2a_A}; \quad a_A = \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

или $E_n \approx -\frac{13.6}{n^2}$ эВ.

n — главное квантовое число



Решение уравнения Шредингера

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + k \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0. \quad (5.13)$$

дает для состояний электрона в атоме водорода те же энергии (5.3), (5.6), что и модель Бора, и волновые функции $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$, называемые атомными орбиталями (АО)

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (5.14)$$

Здесь r, θ, φ — сферические координаты, $m = m_l$ — магнитное орбитальное квантовое число, l — орбитальное квантовое число $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

$$m = m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l. \quad (5.15)$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos \theta). \quad (5.16)$$

Радиальные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера. Для атома водорода они имеют следующие свойства:

$$R_{nl}(r) = C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad l = n-1, \quad (5.17)$$

$$R_{nl}(r) \rightarrow C_n r^{n-1} \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right), \quad r \rightarrow \infty, \quad 0 \leq l \leq n-1. \quad (5.18)$$

У состояний с максимальным $l = n-1$, которым соответствуют круговые боровские орбиты, радиальная плотность вероятности обнаружения электрона на расстоянии r от ядра

$$p(r) = r^2 R_{nl}^2(r), \quad (5.19)$$

максимальна на расстоянии от ядра

$$r_n = a_0 n^2, \quad (5.20)$$

равном радиусу соответствующей орбиты (5.5).

Атом водорода: радиальные волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad R = \rho^l e^{-\rho/2} \omega(\rho) \quad \rho = \frac{2r}{a}$$

$$\omega = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho) \quad \text{вырожденная гипергеометрическая функция}$$

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

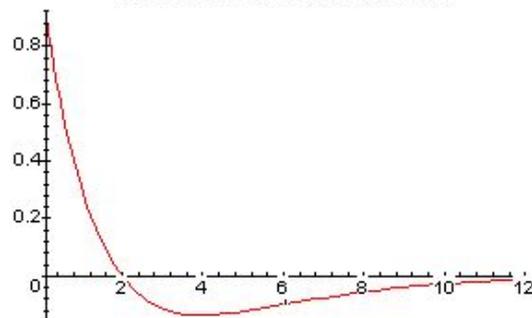
```
> readlib(hypergeom):
> n:=2;l:=0;plot(hypergeom([-n+1+1],[2*l+2],2*r/n)*(2*r/n)^l*exp(-r/n),
r=0.1..3*n*n,title='Radial wave function 2s');
```

n = 2

l = 0

ненормированная волновая функция

Radial wave function 2s



1) Если $m = 9,11 \cdot 10^{-28}$ г есть масса электрона, а $e = e^2$ (e — заряд электрона), то кулоновы единицы совпадают с так называемыми *атомными единицами*. Атомная единица длины

$$\hbar^2/mc^2 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

(так называемый *боровский радиус*). Атомная единица энергии равна

$$me^4/\hbar^2 = 4,36 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} = 27,21 \text{ эВ}$$

(половину этой величины называют *ридбергом*, Ry). Атомная единица заряда есть $e = 4,80 \cdot 10^{-10}$ эл.-стат. единиц. Переход в формулах к атомным единицам производится, формально, положив $e = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$.

Л. Д. ЛАНДАУ и Е. М. ЛИФШИЦ

ТОМ III

КВАНТОВАЯ
МЕХАНИКА

НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ
ТЕОРИЯ

Атом водорода: радиальные волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad R = \rho^l e^{-\rho/2} \omega(\rho) \quad \rho = \frac{2r}{n}$$

$$\omega = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho) \quad \text{вырожденная гипергеометрическая функция}$$

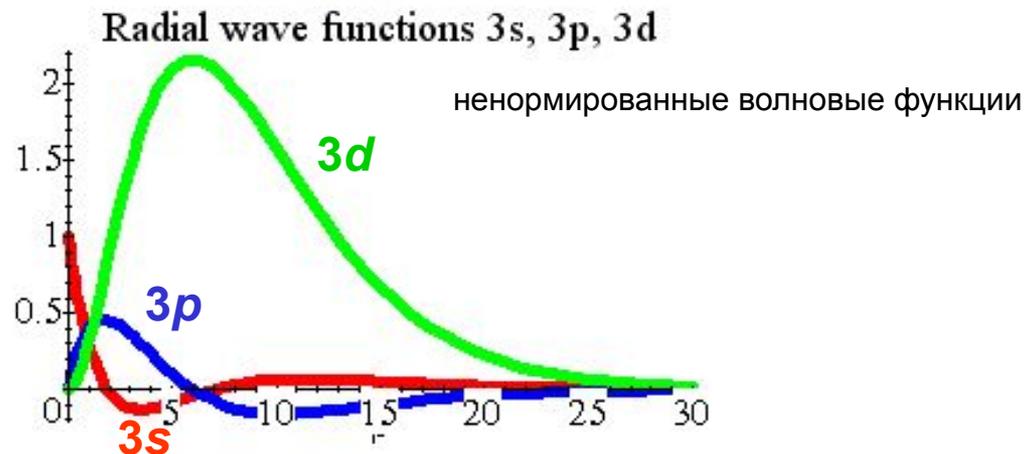
$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots,$$

> `readlib(hypergeom):`

> `Rwf:=(n,l,r)->(2*r/n)^l*exp(-r/n)*hypergeom([-n+l+1],[2*l+2],2*r/n);
n:=3;plot([Rf(n,0,r),Rf(n,1,r),Rf(n,2,r)],r=0..30,color=[red,blue,green],
thickness=5,font=[SYMBOL,12],title='Radial wave functions 3s, 3p, 3d');`

$$Rwf := (n, l, r) \rightarrow \left(2 \frac{r}{n}\right)^l e^{-\frac{r}{n}} \text{hypergeom}\left(\left[-n+l+1\right], \left[2l+2\right], 2 \frac{r}{n}\right)$$

$n := 3$



Атом водорода: волновые функции

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

Пример: $3p, n=3, l=1, m_l=0$

```
> with(orthopoly);
                                [G, H, L, P, T, U]
> readlib(hypergeom): Rwf:=(n, l, r)->(2*r/n)^l*exp(-r/n)*hypergeom([-n+l+1], [2*l+2], 2*r/n);

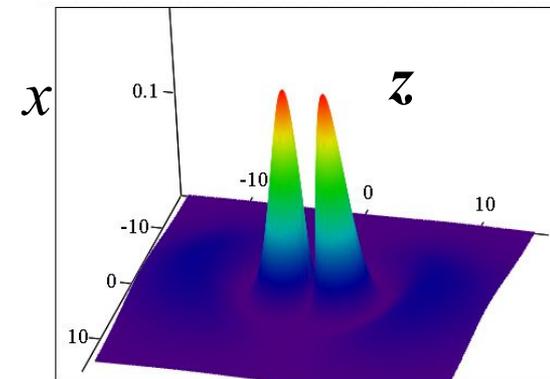
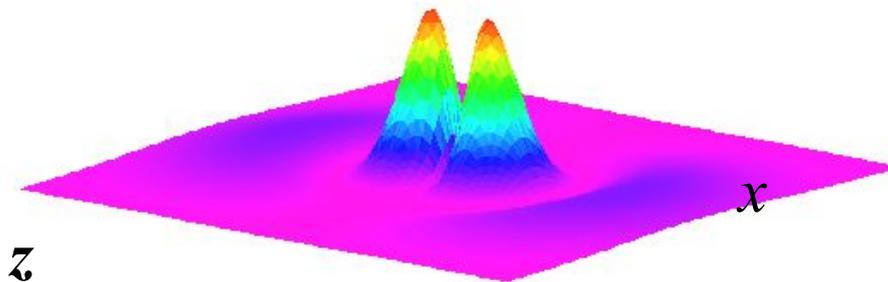
                                Rwf:=(n, l, r) -> (2*r/n)^l * e^(-r/n) * hypergeom([-n+l+1], [2*l+2], 2*r/n)

> Pd:=(n, LL, x, z)->(Rwf(n, LL, sqrt(x*x+z*z)))*P(LL, z/sqrt(x*x+z*z))^2;
                                n=3
                                LL=2

                                Pd:=(n, LL, x, z) -> Rwf(n, LL, sqrt(x^2+z^2))^2 * P(LL, z/sqrt(x^2+z^2))^2

> n:=3;LL:=1;plot3d(Pd(n, LL, x, z), x=-15..15, z=-15..15, grid=[100,100], title='3d Graph');
```

3d Graph



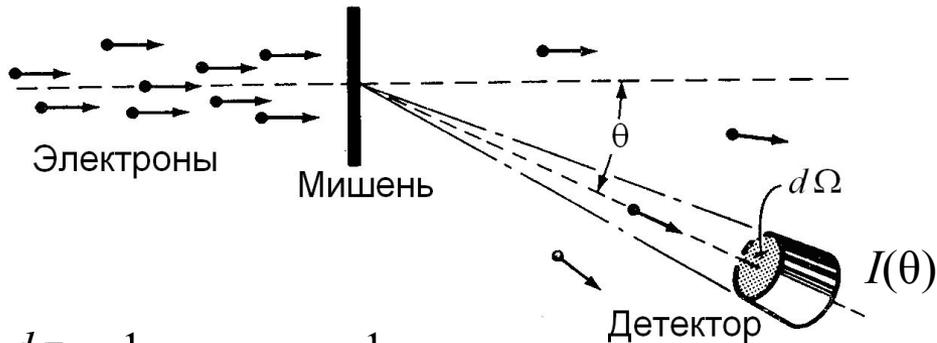
pd

Вопрос 8.

1. Теория упругого рассеяния:
дифференциальное сечение рассеяния,
волновая функция и амплитуда рассеяния
2. Борновское приближение.
3. Парциальное разложение амплитуды
рассеяния.
4. Оптическая модель.

Дифференциальное сечение рассеяния

Типичный эксперимент по рассеянию частиц:
упругое рассеяние быстрых электронов на атомных ядрах



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j} I(\theta), \quad d\sigma = \frac{1}{j} I(\theta) d\Omega$$

Рис. 1.

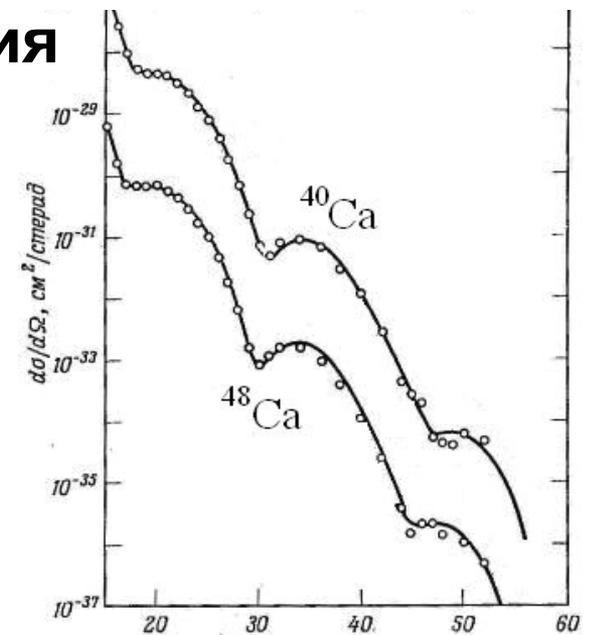


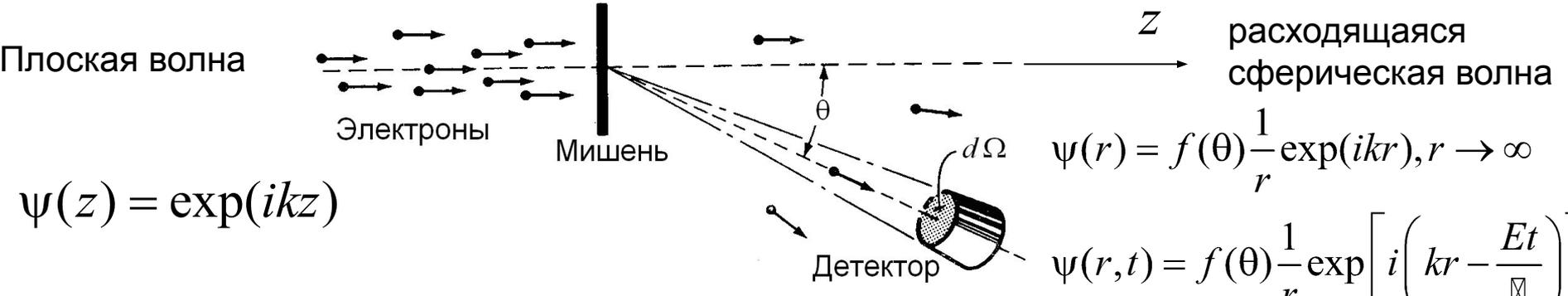
Рис. 2.

Зависимости от угла дифференциальных сечений рассеяния электронов с энергией 750 МэВ на ядрах кальция. Значения сечений рассеяния на ядрах ^{40}Ca увеличены в 10 раз, а на ядрах ^{48}Ca уменьшены в 10 раз.

Основным источником сведений о распределении электрического заряда в атомном ядре явилось исследование рассеяния быстрых электронов на ядрах, начатое Р. Хофштадтером с 1956 г. (Нобелевская премия по физике за 1961 г.). Схема опыта была аналогична схеме опыта Резерфорда с заменой альфа-частиц от радиоактивного препарата на ускоренные электроны. В типичных экспериментах (см. рис. 1) интенсивный пучок релятивистских электронов с энергией от 150 МэВ до нескольких ГэВ направлялся из ускорителя в камеру с мишенью в виде тонкой плёнки. Измерялась интенсивность $I(\theta)$ [1/с] потока электронов, рассеянных в элемент телесного угла $d\Omega$ [ср]. Отношение величины $I(\theta)/d\Omega$ [1/(ср·с)] к плотности потока налетающих частиц j [1/($\text{см}^2 \cdot \text{с}$)] представляет собой дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$ (рис. 2). Его значения принято записывать в $\text{см}^2/\text{ср.}$, $\text{фм}^2/\text{ср.}$ (1 фм = 10^{-15} м), б/ср. (1 бн = 1 барн = 10^{-24} см^2).

Волновая функция ψ и амплитуда рассеяния $f(\theta)$

$U(r)$ – центральное короткодействующее поле



$\psi(z) = \exp(ikz)$

Плотность потока вдоль оси z

$$j_z = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial}{\partial z} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial z} \psi \right) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} 2i \operatorname{Im} \left(\exp(ikz) \frac{\partial}{\partial z} \exp(-ikz) \right) =$$

$$= \frac{\hbar k}{m} = v$$

Отношение $I(\theta)$ к плотности потока налетающих частиц представляет собой дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega$,

выражается в единицах бн/ср, 1 барн равен: $1 \text{ бн} = 10^{-24} \text{ см}^2$.

Волновая функция на больших расстояниях

к формуле 9

$$\psi \approx \exp(ikz) + f(\theta) \frac{1}{r} \exp(ikr), r \rightarrow \infty$$

Поток вероятности $I(\theta)$ через $dS=r^2 d\Omega$

$$I(\theta) = j_r dS = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial}{\partial r} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) \Big|_{\text{Детектор}} dS \approx$$

$$\approx \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{r^2} 2i \operatorname{Im} \left(\exp(ikr) \frac{\partial}{\partial r} \exp(-ikr) \right) r^2 |f(\theta)|^2 d\Omega =$$

$$= \frac{\hbar k}{m} |f(\theta)|^2 d\Omega = v |f(\theta)|^2 d\Omega$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{j_z} \frac{I(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2, d\sigma = \frac{1}{16j_z} I(\theta) = |f(\theta)|^2 d\Omega$$

к формуле 9

Волновая функция

$$\psi^{(0)} = \exp(ikz)$$

для свободного движения

$$\Delta\psi^{(0)} + k^2\psi^{(0)} = 0,$$

для точного уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + k^2\psi - \frac{2m}{\hbar^2}U\psi = 0$$

приближение для волновой функции:

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)}, \quad \psi^{(1)} \ll \psi^{(0)}.$$

Для приближенного уравнения

$$\Delta\psi^{(1)} + k^2\psi^{(1)} = \frac{2m}{\hbar^2}U\psi^{(0)}$$

приближенное решение на больших расстояниях:

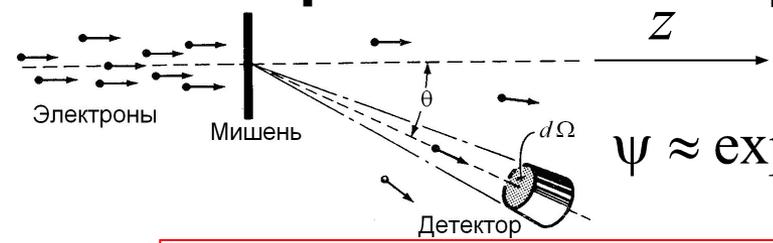
$$\psi^{(1)} = \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ikr)}{r} \int \frac{2m}{\hbar^2} U(r') \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}') dV'$$

$$\psi^{(1)} = f(\theta) \frac{1}{r} \exp(ikr)$$

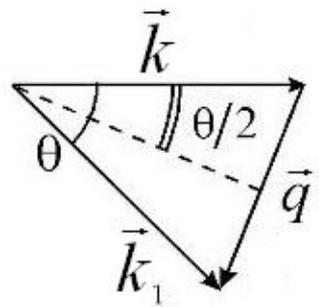
$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) dV$$

Борновское приближение

$U(r)$ – центральное короткодействующее поле



$$\psi \approx \exp(ikz) + f(\theta) \frac{1}{r} \exp(ikr)$$



Дифференциальное сечение рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$

формулы 10

$$f(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty U(r) \sin(qr) r dr$$

$$q = 2k \sin(\theta/2)$$

Условия применимости

при больших скоростях

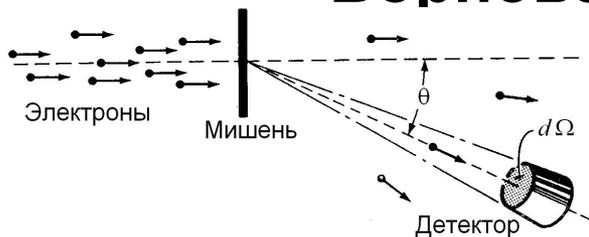
формулы 10

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

при малых скоростях

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad ka \ll 1$$

Борновское приближение в MathCAD



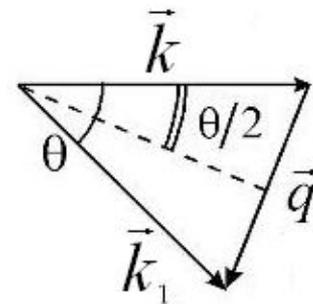
Дифференциальное сечение
рассеяния

в центральном
поле $U(r)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

$$f(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} U(r) \sin(qr) r dr$$

$$q = 2k \sin(\theta/2)$$

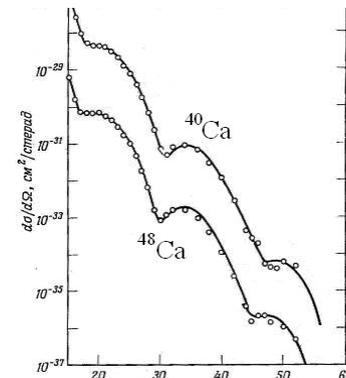
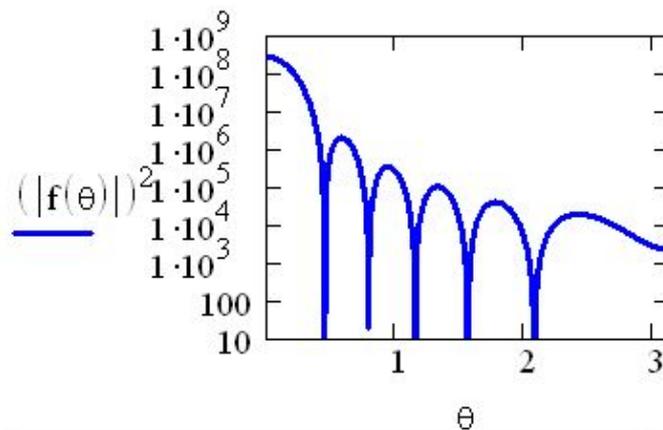
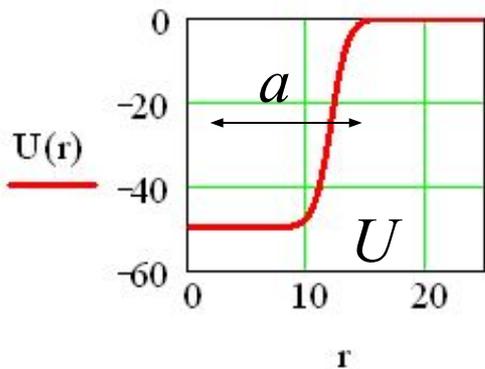


$$r0 := 12 \quad ainv := 1.43 \quad v0 := 50$$

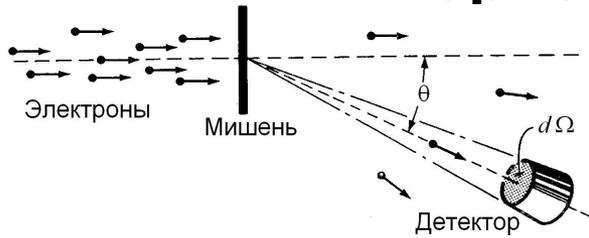
$$k := 1 \quad q(\theta) := 2 \cdot k \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$U(r) := -v0 \cdot \frac{1}{1 + \exp[(r - r0) \cdot ainv]}$$

$$f(\theta) := \frac{1}{q(\theta)} \cdot \int_0^{10} U(r) \cdot \sin(r \cdot q(\theta)) \cdot r dr$$



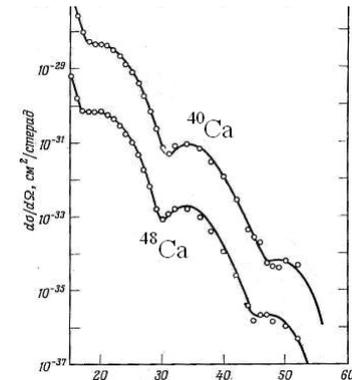
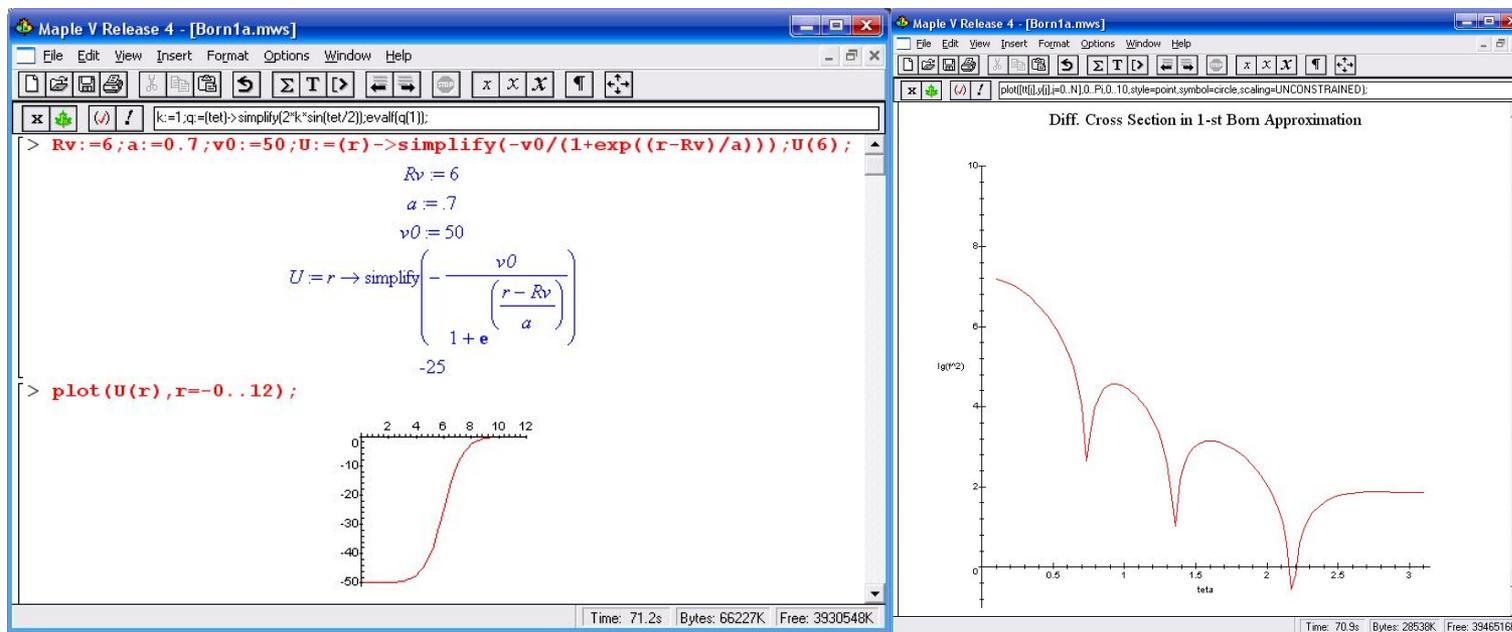
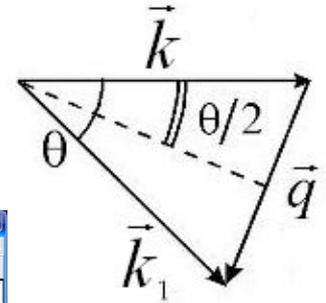
Борновское приближение в Maple



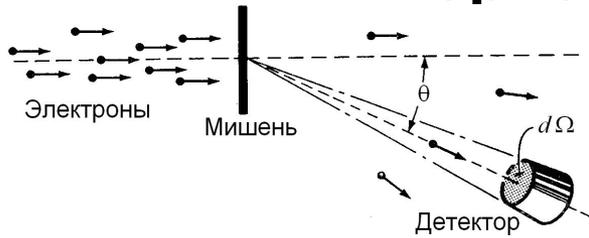
Дифференциальное сечение
рассеяния
в центральном
поле $U(r)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

$$f(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} U(r) \sin(qr) r dr \quad q = 2k \sin(\theta/2)$$



Борновское приближение в Maple



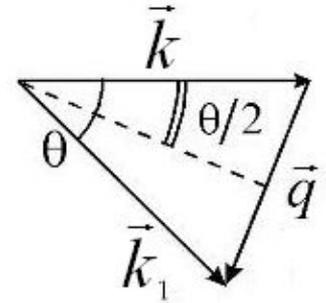
Дифференциальное сечение
рассеяния

в центральном
поле $U(r)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

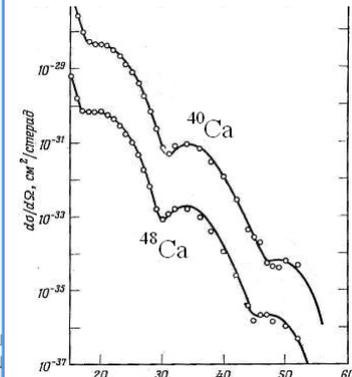
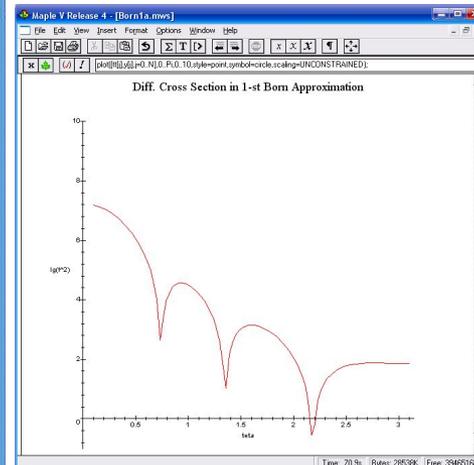
$$f(\theta) = -\frac{m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} U(r) \sin(qr) r dr$$

$$q = 2k \sin(\theta/2)$$



```

Maple V Release 4 - [Born1a.mws]
File Edit View Insert Format Options Window Help
k:=1;q:=(tet)->simplify(2*k*sin(tet/2));evalf(q(1));
> k:=1;q:=(tet)->simplify(2*k*sin(tet/2));evalf(q(1));
      k := 1
      q := tet -> simplify(2 k sin(1/2 tet))
      9588510772
> q1:=q(1);f1:=-1/q1*int( U(r)*r*sin(r*q1), r=0..20 );evalf(f1);
      q1 := 2 sin(1/2)
      20.
      -50.
      r sin(.9588510772 r)
      (1.428571429 r - 8.571428574) dr
      1. + e
      0
      1/2
      sin(1/2)
      -178.6534486
> N:=100;h:=0.03;y:=array(0..N);tt:=array(0..N);for i from 0 by 1
to N do t:=h*i+0.1;tt[i]:=t;q1:=q(t);f:=-1/q1*int(
U(r)*r*sin(r*q1), r=0..20);ff:=log10(f*f);y[i]:=evalf(ff);od;
plot([tt[j],y[j]],j=0..N),0..Pi,-1..10,scaling=UNCONSTRAINED,label
s=[`teta`,`lg(f^2)`],title=`Diff. Cross Section in 1-st Born
Approximation`);
  
```



Компьютерное задание Д3. Борновское приближение

Парциальное разложение амплитуды рассеяния:

волновая функция частицы в центральном поле

Стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(r)\psi = E\psi, \quad \Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(r))\psi = 0$$

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Здесь r, θ, φ – сферические координаты, l – орбитальное квантовое число

$m = m_l$ – магнитное орбитальное квантовое число,

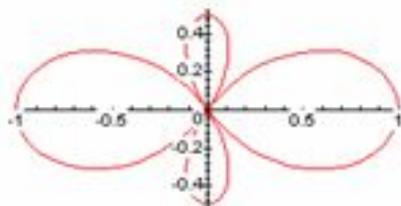
$$m = m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l.$$

Функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ называются сферическими гармониками (или сферическими функциями), в случае $m = m_l = 0$ они выражаются через так называемые многочлены (полиномы) Лежандра

$$Y_{l0}(\theta) = C_l P_l(\cos\theta).$$

Радialные части $R_{nl}(r)$ находятся путем решения радиального уравнения Шредингера.

```
> with(orthopoly):P(2,x);  
[G,H,L,P,T,U]  
3/2 x^2 - 1/2  
> plot([P(2,cos(t)),t,t=0..2*Pi],coords=polar,scaling=CONSTRAINED);
```



Парциальное разложение волновой функции свободного движения

плоская волна \xrightarrow{z}

$j_l(x)$ – сферические функции Бесселя

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \approx$$

$$\approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) P_l(\cos \theta)$$

Волновая функция на больших расстояниях от начала координат

парциальные волны в MathCAD:

$k := 1$ $R(L,r) := js(L,k \cdot r)$

$L1 := 0$

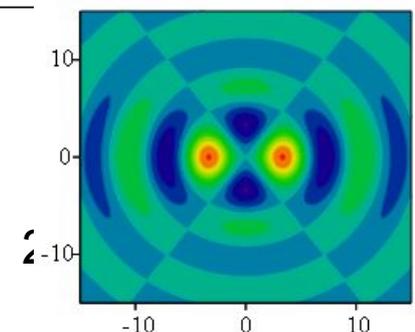
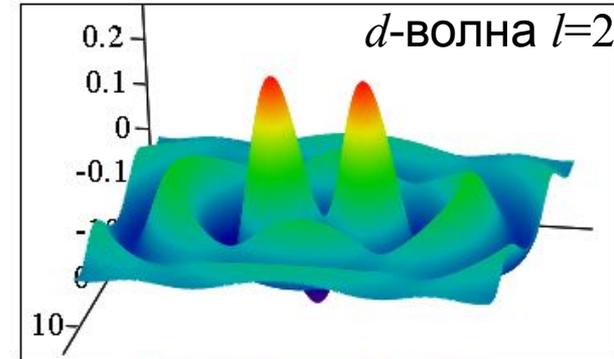
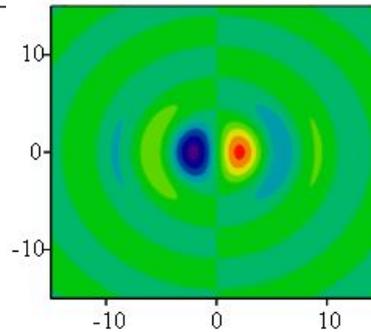
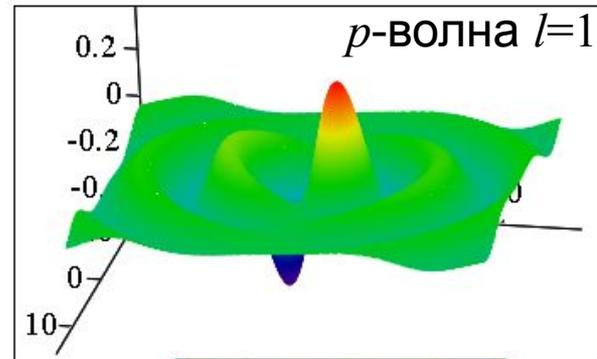
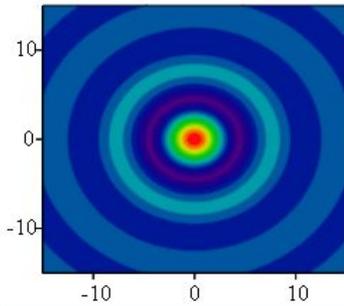
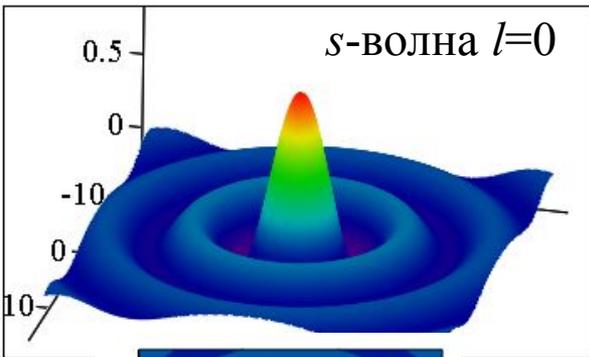
$$pw(x,z) := R(L1, \sqrt{x^2 + z^2}) \cdot \text{Leg}\left(L1, \frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right)$$

$L1 := 1$

$$pw(x,z) := R(L1, \sqrt{x^2 + z^2}) \cdot \text{Leg}\left(L1, \frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right)$$

$L1 := 2$

$$pw(x,z) := R(L1, \sqrt{x^2 + z^2}) \cdot \text{Leg}\left(L1, \frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right)$$



Парциальное разложение волновой функции свободного движения

плоская волна \xrightarrow{z}

парциальные волны в Maple:

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \approx$$

$$\approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sin(kr - \frac{\pi l}{2}) P_l(\cos \theta)$$

Волновая функция на больших расстояниях от начала координат

s -волна $l=0$

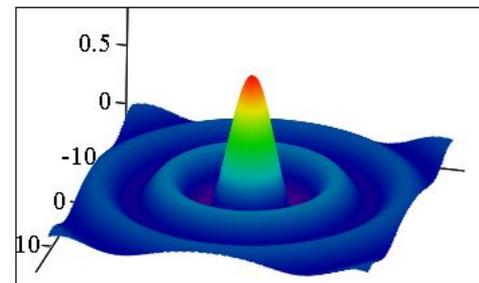
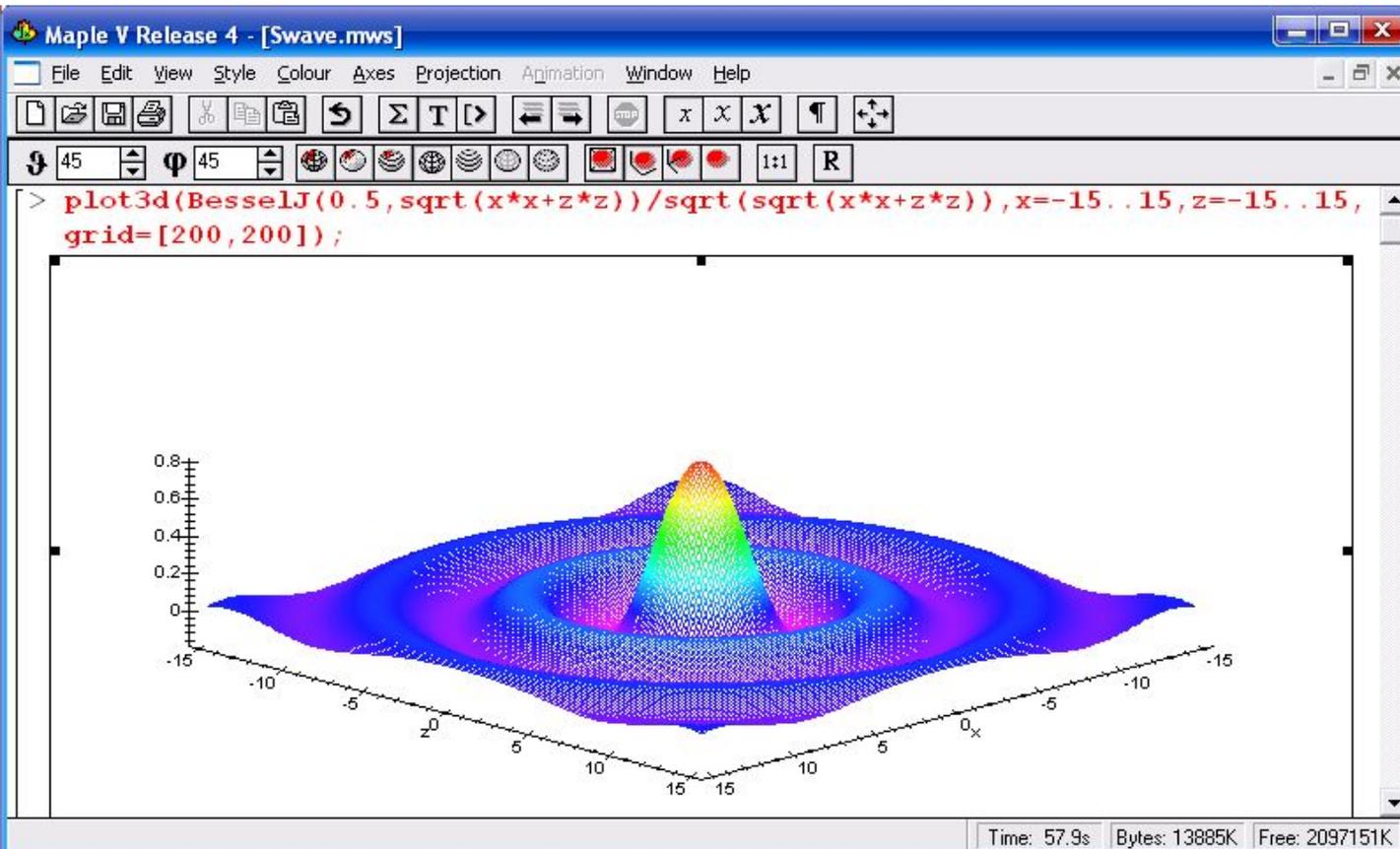
$j_l(x)$ – сферические функции Бесселя

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr)$$

$$k := 1 \quad R(L,r) := js(L,k \cdot r)$$

$$L1 := 0$$

$$pw(x,z) := R(L1, \sqrt{x^2 + z^2}) \cdot \text{Leg}\left(L1, \frac{z}{\sqrt{x^2 + z^2}}\right)$$



MathCAD

3

Парциальное разложение волновой функции свободного движения

плоская волна \xrightarrow{z}

парциальные волны:

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \approx$$

$$\approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) P_l(\cos \theta)$$

Волновая функция на больших расстояниях от начала координат

p -волна $l=1$

$j_l(x)$ – сферические функции Бесселя

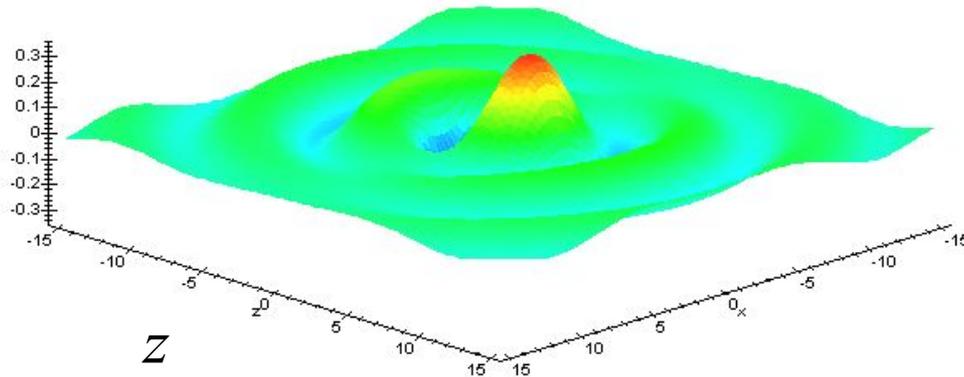
$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr)$$

[G, H, L, P, T, U]

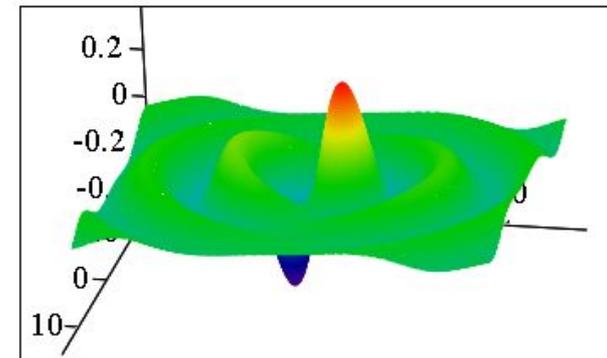
> l:=1; f:=(x,y)->BesselJ(l+0.5, sqrt(x*x+z*z))/sqrt(sqrt(x*x+z*z))*P(l, z/sqrt(x*x+z*z));

$$f(x,y) \rightarrow \frac{\text{BesselJ}(l+0.5, \sqrt{x^2+z^2}) P\left(l, \frac{z}{\sqrt{x^2+z^2}}\right)}{\sqrt{\sqrt{x^2+z^2}}}$$

> plot3d(f(x,z), x=-15..15, z=-15..15, grid=[100,100]);



L1 := 1
 pw(x,z) := R(L1, sqrt(x^2+z^2)) * Leg(L1, z/sqrt(x^2+z^2))



MathCAD

Z

Парциальное разложение волновой функции свободного движения

плоская волна \xrightarrow{z}

парциальные волны:

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \approx$$

$$\approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sin(kr - \frac{\pi l}{2}) P_l(\cos \theta)$$

Волновая функция на больших расстояниях от начала координат

d -волна $l=2$

$j_l(x)$ – сферические функции Бесселя

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr)$$

> with(orthopoly);

[G, H, L, P, T, U]

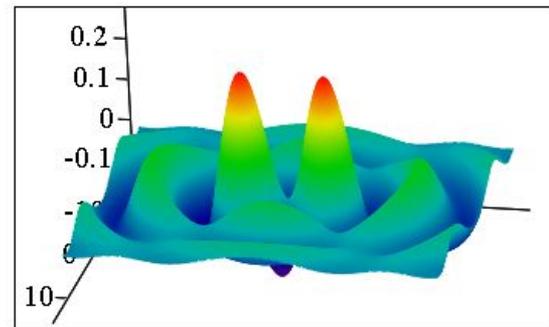
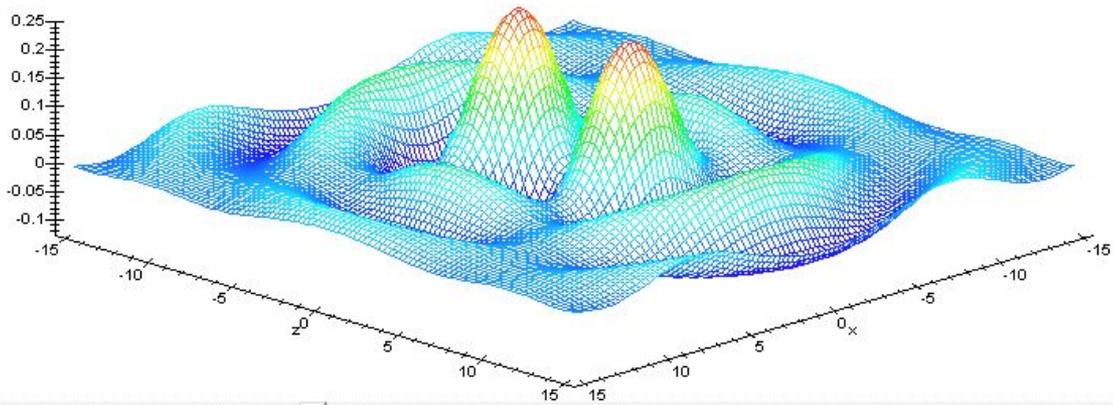
> f := (x, z) -> BesselJ(2.5, sqrt(x*x+z*z)) / sqrt(sqrt(x*x+z*z)) * P(2, z/sqrt(x*x+z*z));

$$f = (x, z) \rightarrow \frac{\text{BesselJ}(2.5, \sqrt{x^2+z^2}) P\left(2, \frac{z}{\sqrt{x^2+z^2}}\right)}{\sqrt{\sqrt{x^2+z^2}}}$$

> plot3d(f(x, z), x=-15..15, z=-15..15, grid=[100, 100]);

L1 := 2

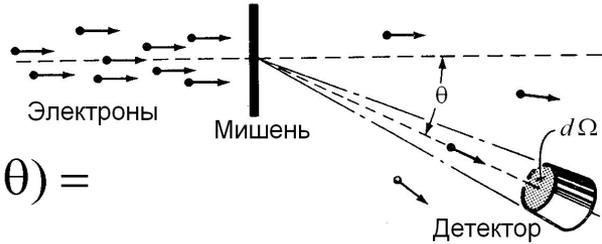
$$pw(x, z) := R(L1, \sqrt{x^2+z^2}) \cdot \text{Leg}\left(L1, \frac{z}{\sqrt{x^2+z^2}}\right)$$



Парциальное разложение волновой функции и амплитуды рассеяния

$U(r)$ – центральное короткодействующее поле

Плоская волна



Z Волновая функция
на больших расстояниях от рассеивающего центра

$$\begin{aligned} \exp(ikz) &= \exp(ikr \cos \theta) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} a_l \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) P_l(\cos \theta) \approx \\ &\approx \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$

радиальная часть
парциальной волны
при свободном движении

$$\psi \approx \exp(ikz) + f(\theta) \frac{1}{r} \exp(ikr)$$

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l (2l+1) R_{kl}(r) P_l(\cos \theta)$$

$$\psi \approx \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} A_l (2l+1) \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) P_l(\cos \theta)$$

радиальная часть парциальной волны при рассеянии

$$\psi \approx \frac{1}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[(-1)^l \exp(-ikr) - \exp(2i\delta_l + ikr) \right] P_l(\cos \theta)$$

сходящаяся сферическая волна расходящаяся сферическая волна

Амплитуда рассеяния

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[1 - \exp(2i\delta_l) \right] P_l(\cos \theta)$$

Диагональный элемент матрицы рассеяния $S_L = \exp(2i\delta_L)$

дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

δ_l – парциальные фазы рассеяния

полное сечение рассеяния равно сумме парциальных сечений

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\pi} |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

формулы 11

Радиальная волновая функция для упругого рассеяния медленных частиц в короткодействующем поле

Квадраты радиальных частей волновой функции и фаза рассеяния δ_0

$\sin^2(kr)$ Свободное движение

$\sin^2(kr + \delta_0)$ Рассеяние

$$\delta_0 = ka, \quad k \rightarrow 0$$

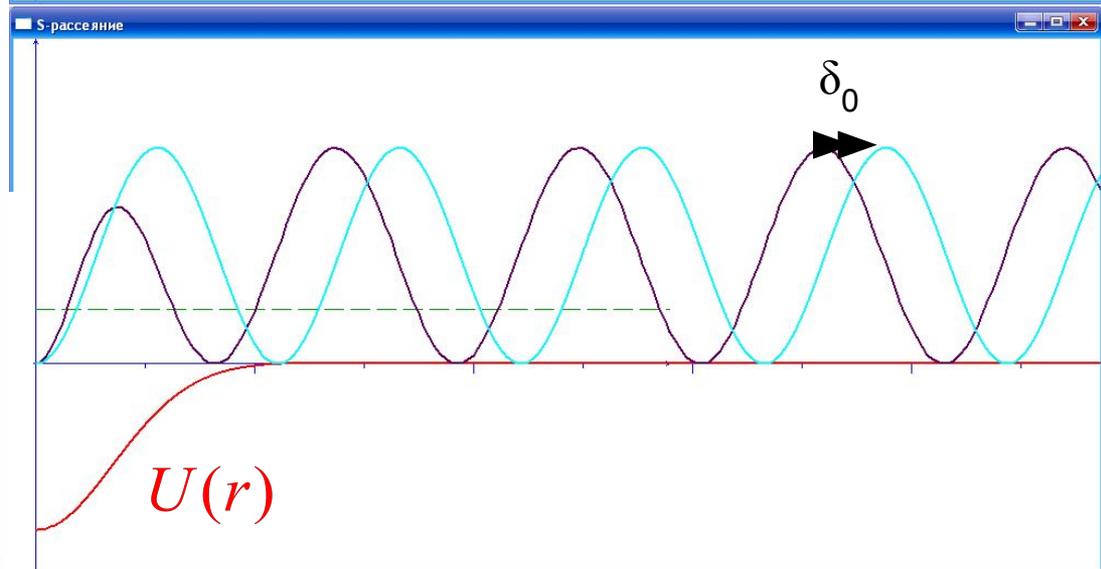
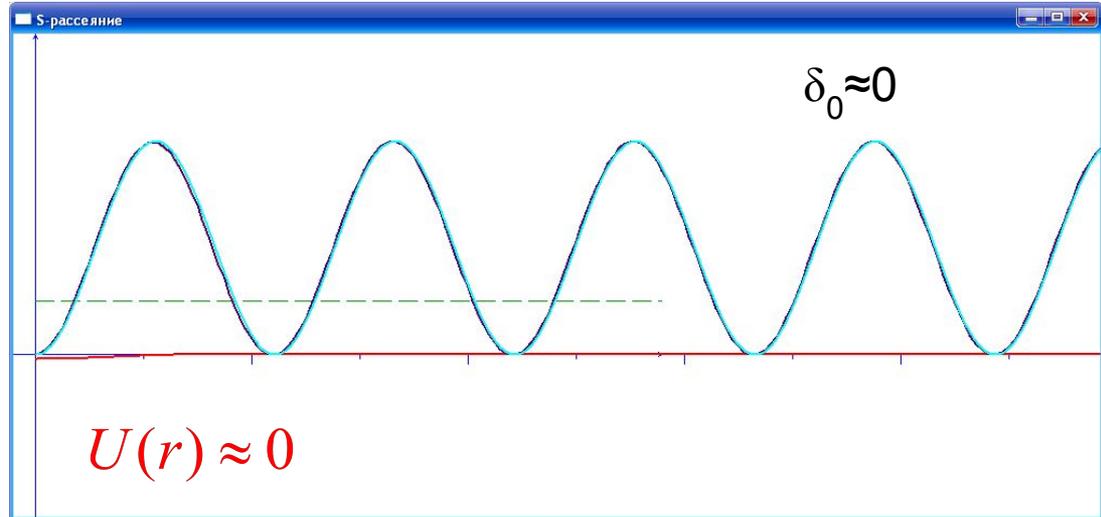
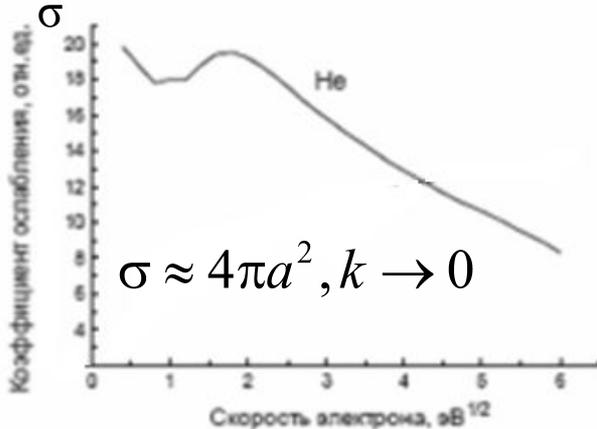
a – длина рассеяния

формулы 11

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx 4\pi a^2$$

Рассеяние изотропно

$$f = \frac{1}{2ik} [\exp(2i\delta_0) - 1] P_0$$

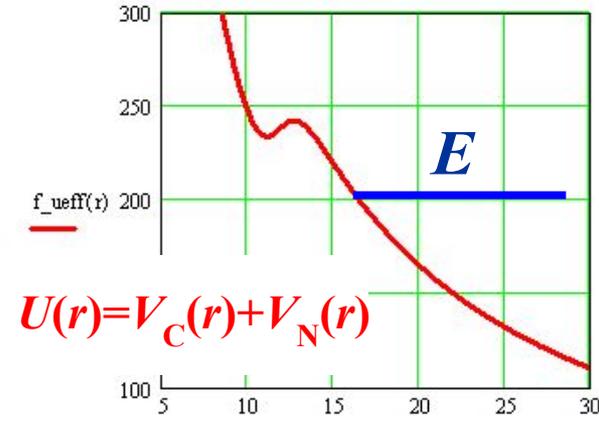
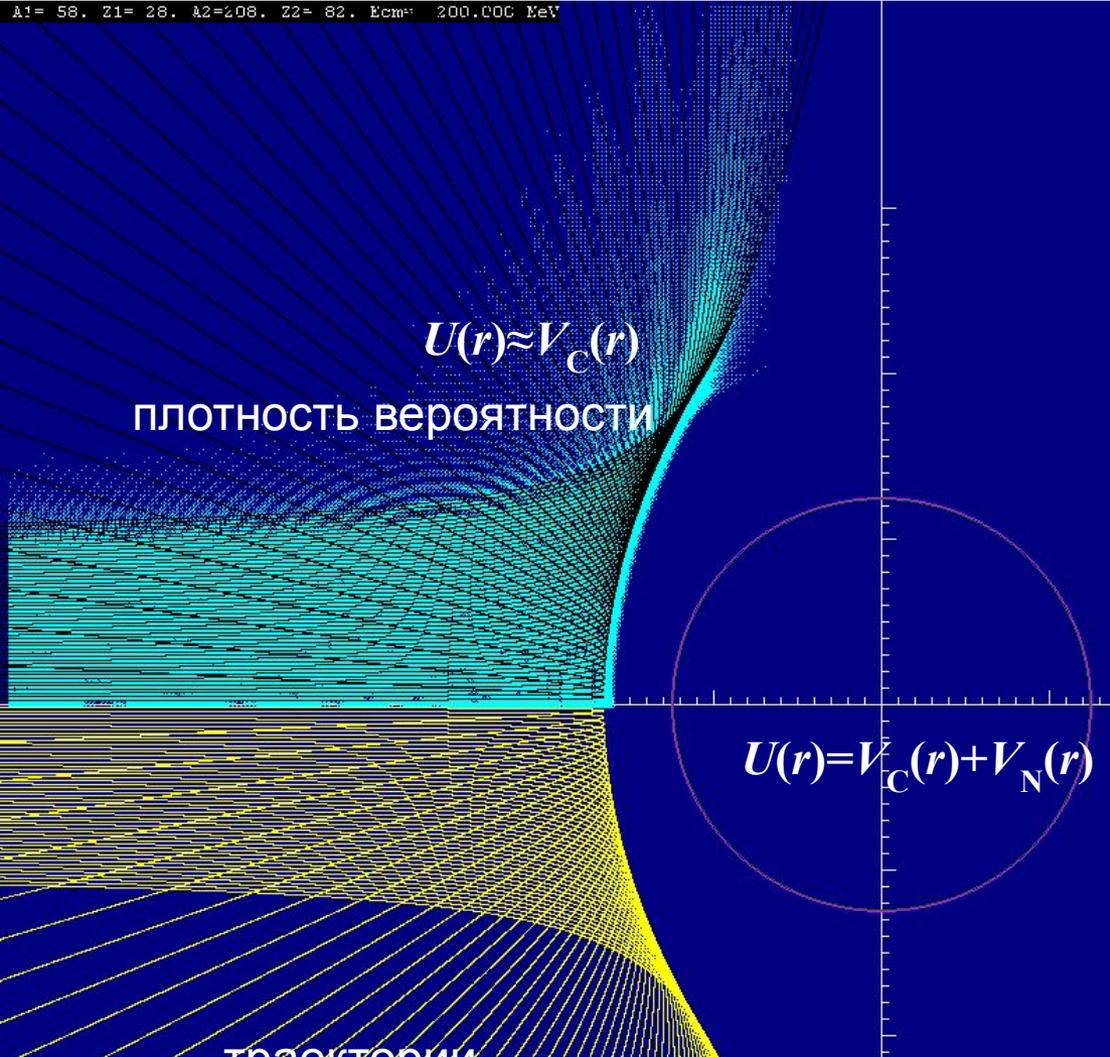


Парциальное разложение волновой функции для рассеяния быстрых тяжелых частиц в кулоновском поле

$$\psi = \sum_{l=0}^{L_{\max}} A_l (2l+1) R_{kl}(r) P_l(\cos \theta)$$

Ni+Pb E=200 МэВ

A1= 58, Z1= 28, A2=208, Z2= 82, Ecm= 200.000 MeV



Волновая функция на больших расстояниях от ядра при $r \rightarrow \infty$

$$\psi_k(r, \theta) = \exp[ikr \cos \theta + i\eta \ln(kr - kr \cos \theta)] + \frac{f_C(\theta)}{r} \exp[i(kr - \eta \ln 2kr)].$$

η – кулоновский параметр (параметр Зоммерфельда)

$$\eta = \frac{\mu Z_1 Z_2 e^2}{k \hbar^2}, \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{м}}{\text{Дж} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с} \cdot \text{с}} \right]$$

Кулоновская амплитуда рассеяния

$f_C(\theta)$ известна в явном виде, сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = |f_C(\theta)|^2 = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \sin^{-4} \theta / 2$$

совпадает с классической формулой

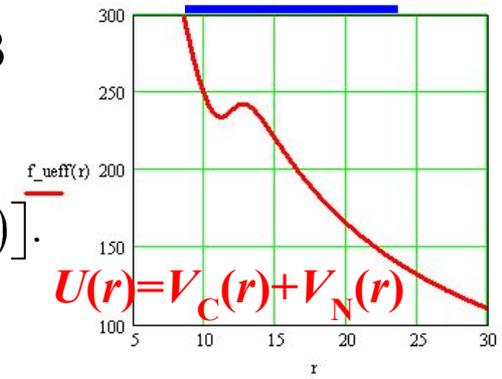
Парциальное разложение волновой функции для рассеяния быстрых тяжелых частиц в поле кулоновских и ядерных сил

E

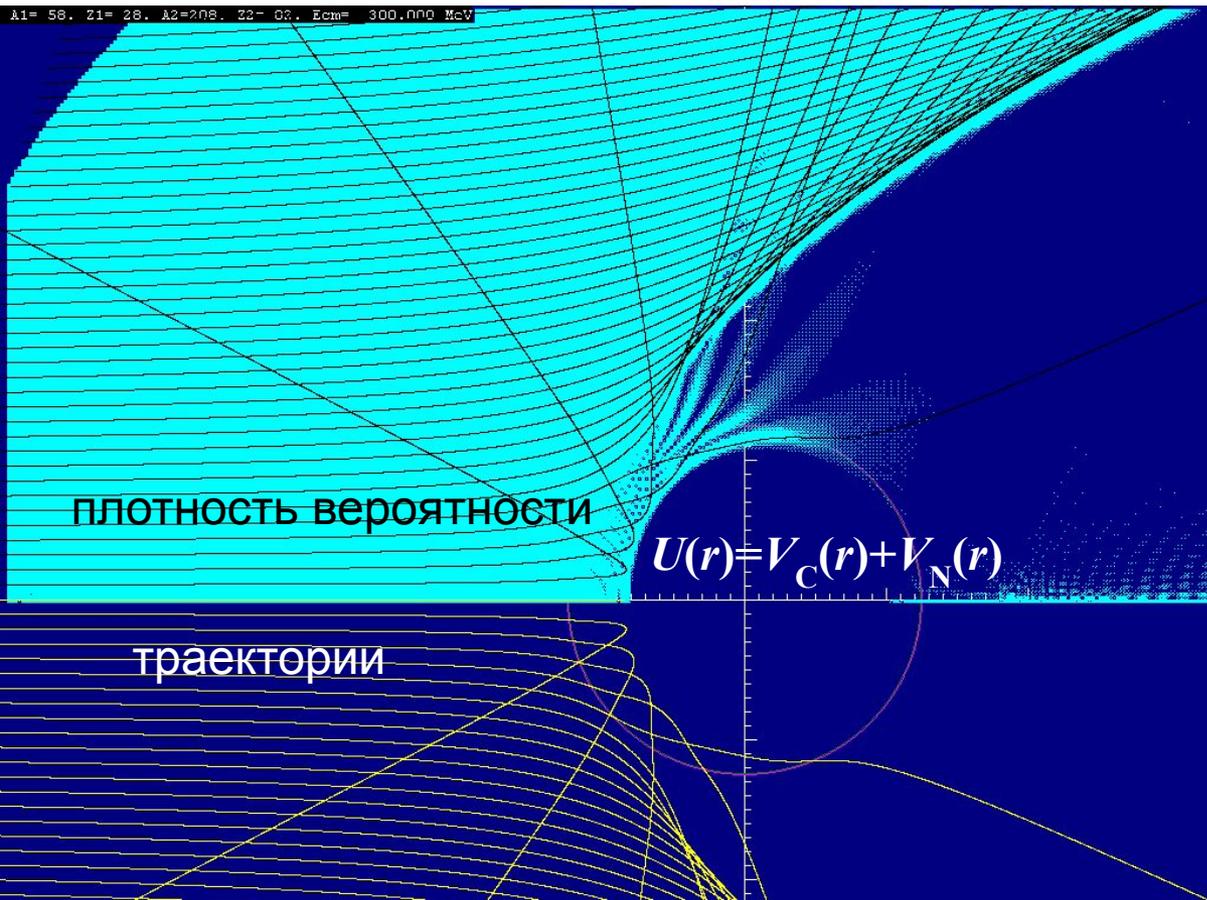
Ni+Pb $E=300$ МэВ

Волновая функция на больших расстояниях от ядра при $r \rightarrow \infty$

$$\psi_k(r, \theta) = \exp\left[ikr \cos \theta + i\eta \ln(kr - kr \cos \theta) \right] + \frac{f_C(\theta) + f_N(\theta)}{r} \exp\left[i(kr - \eta \ln 2kr) \right].$$



$$U(r) = V_C(r) + V_N(r)$$



η – кулоновский параметр (параметр Зоммерфельда)

$$\eta = \frac{\mu Z_1 Z_2 e^2}{k \hbar^2}, \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{м}}{\text{Дж} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с} \cdot \text{с}} \right]$$

Кулоновская амплитуда рассеяния $f_C(\theta)$ известна в явном виде

Ядерная амплитуда рассеяния $f_N(\theta)$ находится на основе численного решения радиальных уравнений Шредингера для парциальных волн.

Оптическая модель упругого рассеяния

Различные состояния, образующиеся после столкновения частиц, называют каналами реакции. Например, при столкновении протона с ядром А возможны следующие каналы реакции:

- $p+A \rightarrow p+A$ (упругое рассеяние)
- $p+A^*$ (неупругое рассеяние с возбуждением ядра-мишени)
- $n+A$ (выбивание нейтрона)
- $A1+A2$ (деление ядра)
- другие каналы

При энергиях, превышающих порог неупругих процессов, частица-снаряд может выйти из упругого канала. При этом число упруго рассеянных частиц всегда меньше, чем число частиц налетающих на ядро-мишень.

В нерелятивистской квантовой механике уменьшение потока частиц может быть смоделировано добавлением отрицательной мнимой части $iW(r)$, $W(r) < 0$, к потенциалу взаимодействия ядер $V(r)$.

Нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad \text{Фешбах, 1954 г.}$$

Уравнение непрерывности, описывающее поглощение частиц

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = \frac{2}{\hbar} W(\mathbf{r}) \rho < 0$$

плотность вероятности

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^* \Psi$$

вектор плотности потока вероятности

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi)$$

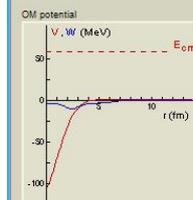
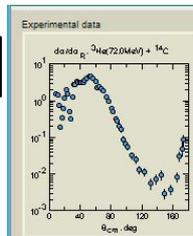
$$V(r) = V_C(r) + V_N(r) \quad |W_0| \ll |V_0|$$

$$W(r) = \frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}$$

объемное поглощение

$$W(r) = W_0 \exp\left(-\frac{(r - R_W)^2}{b^2}\right)$$

поверхностное поглощение



NRV

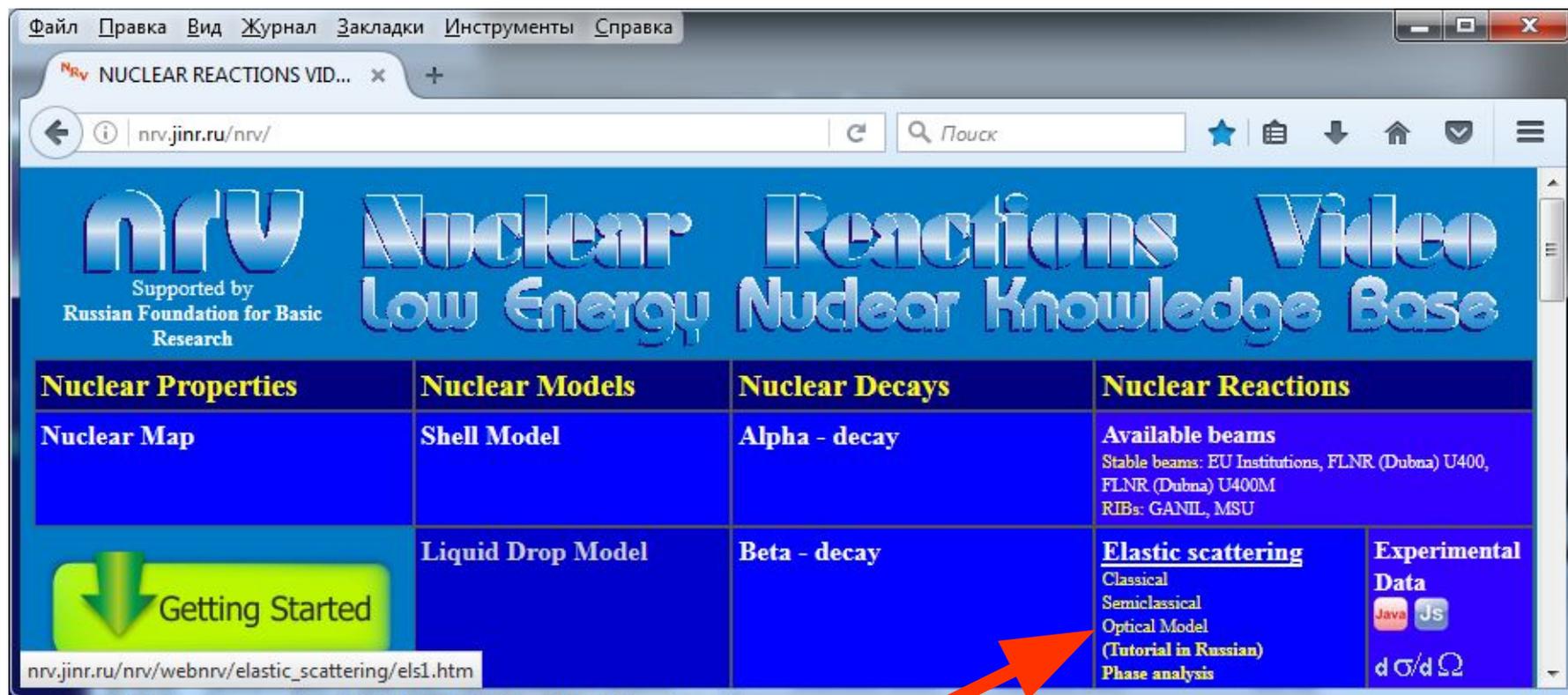
Компьютерное задание Д4 Оптическая модель упругого рассеяния

Выполнить анализ экспериментальных данных по упругому рассеянию, (для максимальной энергии из имеющихся) и расчеты дифференциального сечения в оптической модели с помощью базы знаний NRV для реакций ${}^6\text{Li}+\text{X}$

X

	A	B	C	D	E	F	G	H
1			Реферат	Дата	Д1	Д2	Д3	Д4
2	1	Бетенева Валентина	1	04.мар				12C
3	2	Вишневский Петр	6	25.мар				16O
4	3	Гладышев Александр	9	01.апр				27Al
5	4	Евсенкин Владимир	13	15.апр				40Ca
6	5	Мардыбан Мария	5	18.мар				48Ca
7	6	Ковалев Олег	7	25.мар				59Co
8	7	Цегельник Никита	11	08.апр				58Ni
9								
10	1	Акжунусов Айдос	3	11.мар				60Ni
11	2	Бердыхалых Тилеу	10	08.апр				90Zr
12	3	Дик Виктория	15	22.апр				116Sn
13	4	Дурбенов Райымбек	8Б	01.апр				208Pb
14	5	Жилмагамбетова Аяулым	8А	01.апр				92Zr
15	6	Кобей Абылай	14	22.апр				54Fe
16	7	Манашова Мунира	12	15.апр				44Ca
17	8	Рахимов Адиль	2	11.мар				26Mg
18	9	Тюлемисова Акмарал	4	18.мар				19F

Компьютерное задание Д4 Оптическая модель упругого рассеяния



The screenshot shows a web browser window with the URL nrv.jinr.ru/nrv/. The page features a blue header with the NRV logo and the text "Nuclear Reactions Video Low Energy Nuclear Knowledge Base". Below the header is a navigation menu with four main categories: "Nuclear Properties", "Nuclear Models", "Nuclear Decays", and "Nuclear Reactions". Under "Nuclear Reactions", there are sub-links for "Available beams", "Elastic scattering", and "Experimental Data". The "Elastic scattering" link is highlighted with a red arrow. The "Elastic scattering" sub-link includes "Classical", "Semiclassical", "Optical Model (Tutorial in Russian)", and "Phase analysis". The "Experimental Data" sub-link includes "Java" and "JS" icons and the symbol $d\sigma/d\Omega$.

Nuclear Properties	Nuclear Models	Nuclear Decays	Nuclear Reactions
Nuclear Map	Shell Model	Alpha - decay	Available beams Stable beams: EU Institutions, FLNR (Dubna) U400, FLNR (Dubna) U400M RIBs: GANIL, MSU
Getting Started	Liquid Drop Model	Beta - decay	Elastic scattering Classical Semiclassical Optical Model (Tutorial in Russian) Phase analysis
			Experimental Data Java JS $d\sigma/d\Omega$

Сетевая база знаний NRV по ядерной физике низких энергий. URL: <http://nrv.jinr.ru/> ЛЯР им. Г.Н. Флерова ОИЯИ

ОПТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ УПРУГОГО РАССЕЙЯНИЯ В БАЗЕ ЗНАНИЙ NUCLEAR REACTION VIDEO (NRV) Методические указания к практическим и лабораторным занятиям (на русском языке)

Пример расчетов оптической модели в NRV

для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^6\text{Li}$:

1) экспериментальные данные

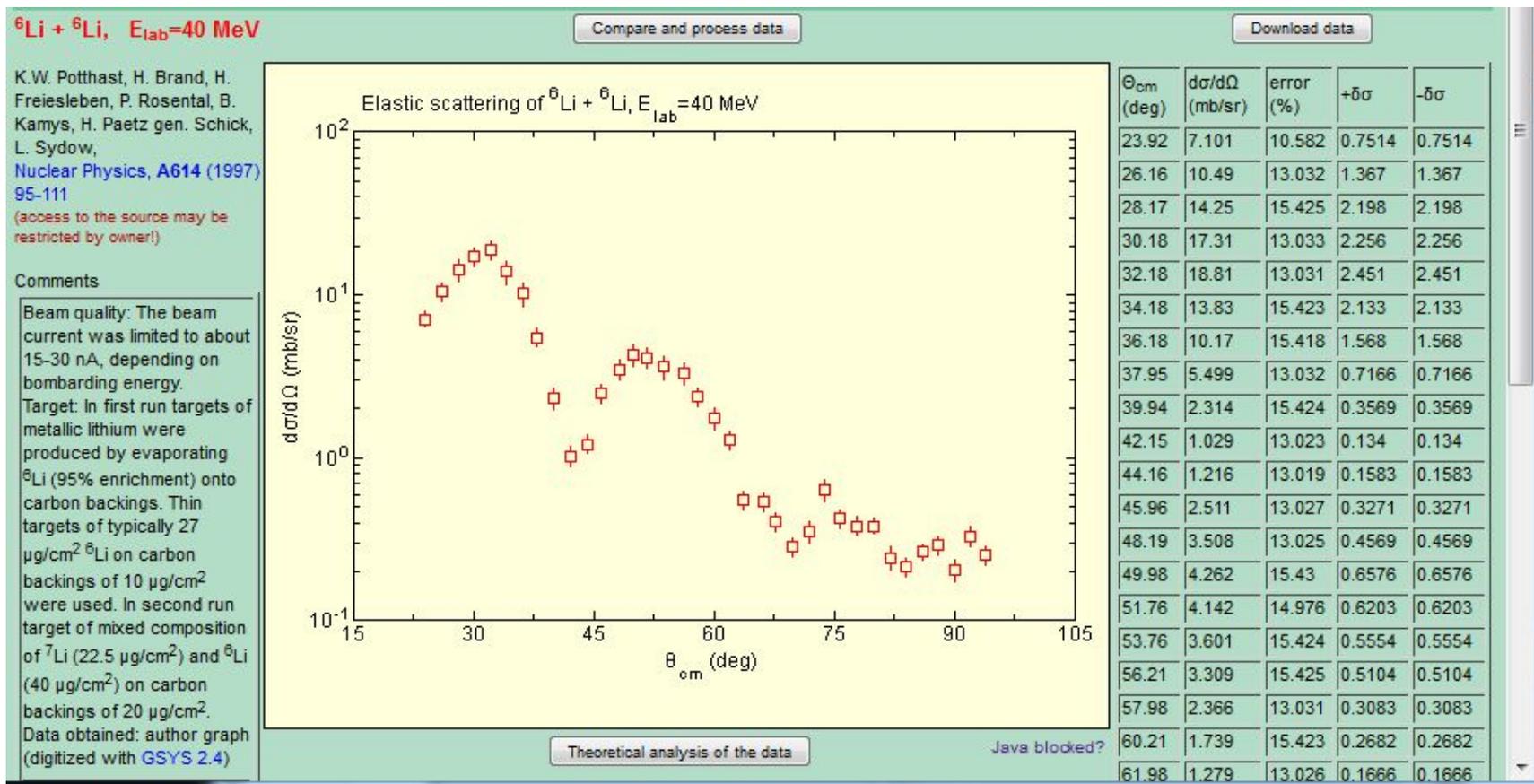


Рис. 1. Экспериментальные данные для упругого рассеяния ядер ${}^6\text{Li}$ на ядрах ${}^6\text{Li}$ с энергией $E_{\text{lab}}=40 \text{ МэВ}$.

Пример расчетов оптической модели в NRV для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^6\text{Li}$: 2) ввод данных

The screenshot shows the NRV software interface for calculating elastic scattering. The main window is titled "Model" and has tabs for "Classical", "Optical", and "NRV". The "NRV" tab is selected. A red arrow points to the "Description" button in the top right corner, with the word "Описание" written next to it.

The interface is divided into several sections:

- Model:** Reaction (Sample, Open, Save), Projectile (Li, 6), Target (Li, 6), Energy (40 MeV, lab, cm, E/A).
- Experimental data:** Global OMP, OMP Compilations, Prepare, No data.
- Potential forces:** V_0^{vol} (-109.5 MeV), r_0^{vol} (0.663 fm), a^{vol} (0.811 fm), V_0^{sur} , r_0^{sur} , a^{sur} , Proximity b, r_0^{coul} (0.649 fm), N_{Re} , N_{Im} , Folding params.
- Absorptive pot.:** W_0^{vol} (-56.219 MeV), r_0^{vol} (0.766 fm), a^{vol} (0.884 fm), W_0^{sur} , r_0^{sur} , a^{sur} .
- Spin-orbit interaction:** Spin (0, 1/2), V_0 (0 MeV), W_0 (0 MeV), r_0 (0 fm), a (0 fm).
- Integration parameters:** Initial angle (20 deg), Maximal angle (100 deg), Step (1 deg), Partial waves: Sum from L_{out} (0) to L_{max} (26), R_{max} (16.05 fm), Integration step (0.17 fm), b_1 (0 fm), b_{max} (14.05 fm), N_{traj} (100).
- Fitted parameters:** Real part of Optical Potential (Depth of Real Vol., Radius of Real Vol., Diffuseness of Re.Vol.), Imaginary part of Optical Potential (Depth of Imag. Vol., Radius of Imag. Vol., Diffuseness of Im.Vol.), Spin-Orbital Interaction (Real part, Imaginary part, Radius, Diffuseness), Coulomb Interaction (Radius of the Coulomb Potential), Folding potential (N_{Re} , N_{Im}).

Buttons: "Calculate", "No fit", "Maximal number of fit steps" (50), "Stop, when change is less than" (0.001 %).

Рис. 2. Форма для ввода данных для расчетов упругого рассеяния ядер ${}^6\text{Li}$ на ядрах ${}^6\text{Li}$.

Пример расчетов оптической модели в NRV для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^6\text{Li}$: 3) выбор потенциала

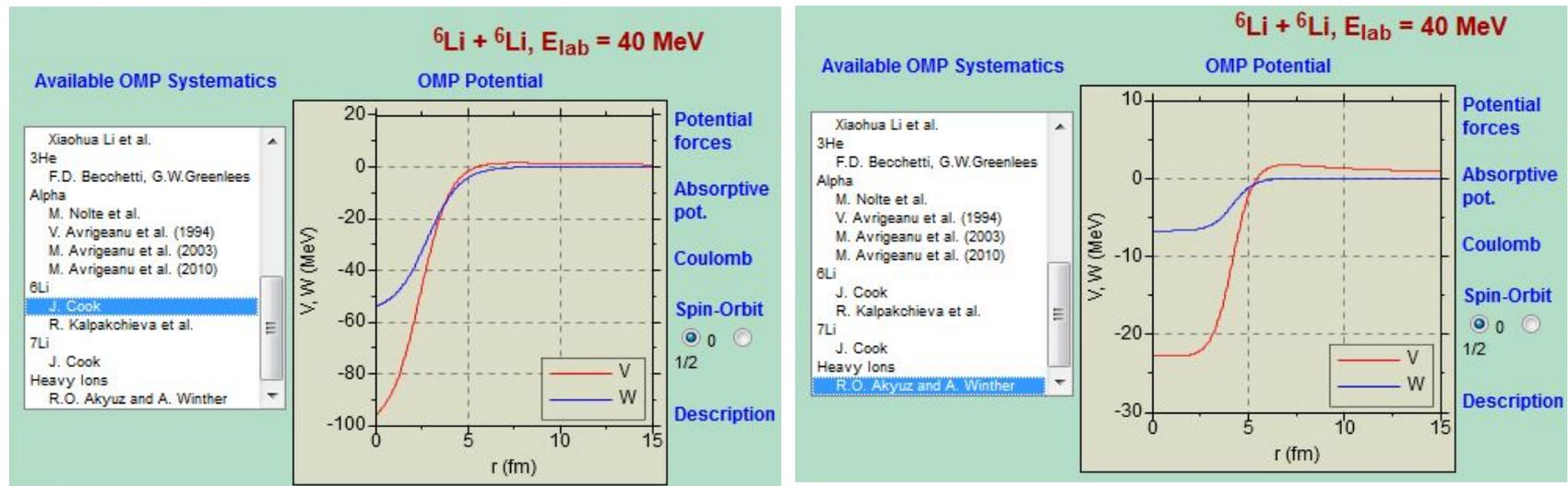


Рис. 3. Примеры выбора систематик для параметров потенциала оптической модели.

Пример расчетов оптической модели в NRV для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^6\text{Li}$: 4) результаты

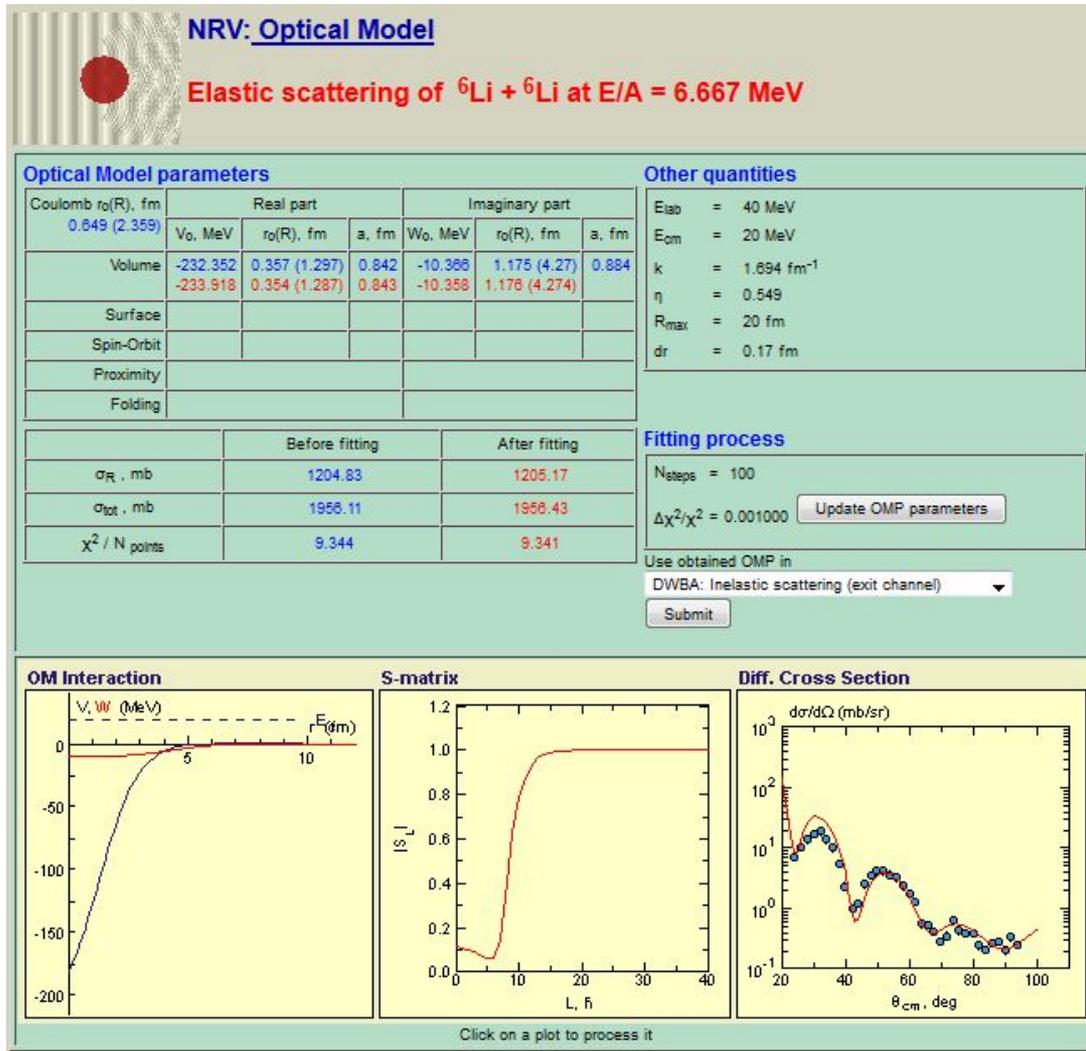
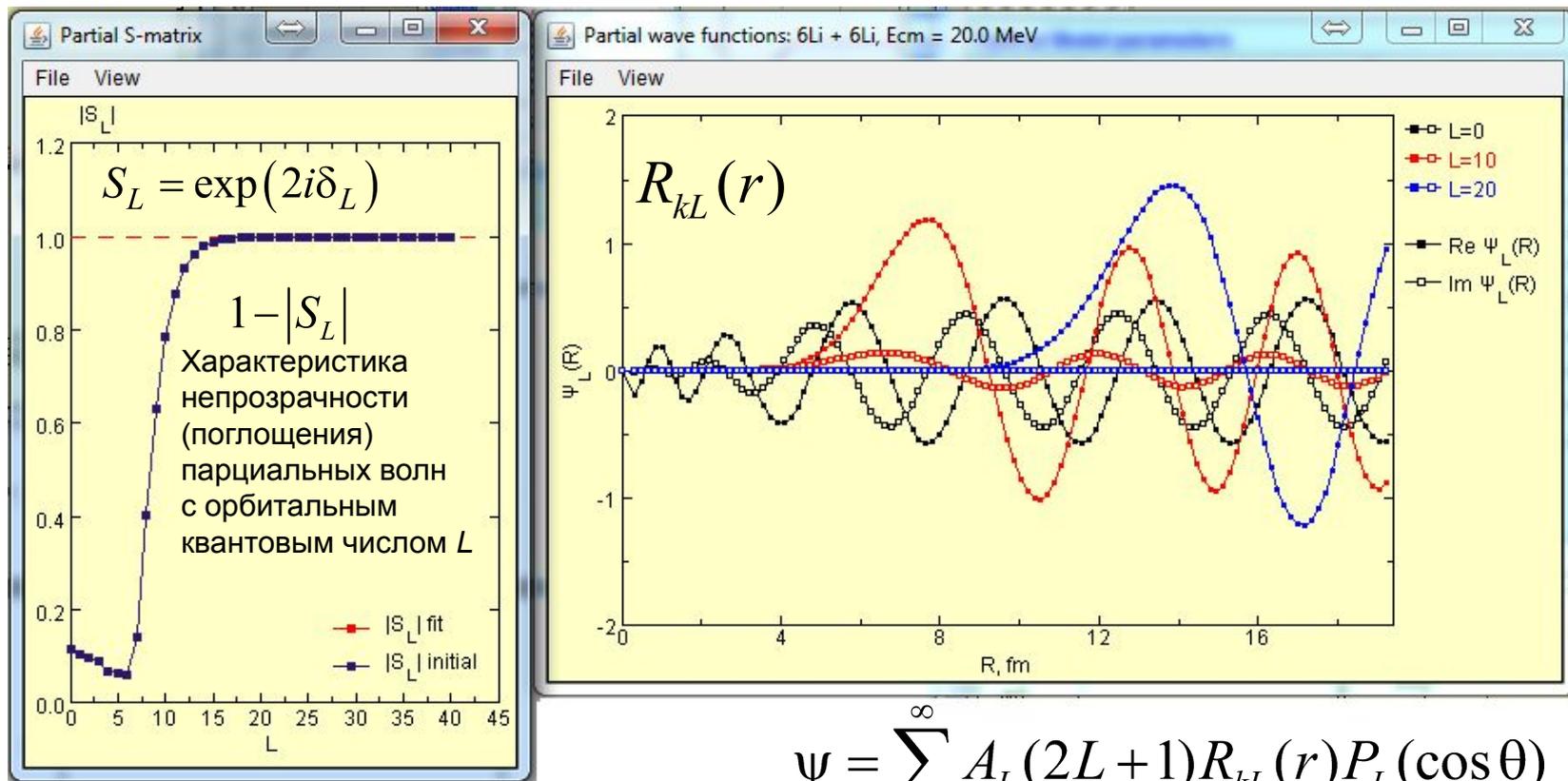


Рис. 4. Пример результатов расчета для начальных данных на рис. 2.

Пример расчетов оптической модели в NRV для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^6\text{Li}$: 5) парциальные волны



$$\psi = \sum_{L=0}^{\infty} A_L (2L+1) R_{kL}(r) P_L(\cos \theta)$$

Рис. 5. Парциальные волны с орбитальными квантовыми числами $L = 0, 10, 20$ (справа) и зависимость парциальной S -матрицы от L для упругого рассеяния ядер ${}^6\text{Li}$ на ядрах ${}^6\text{Li}$ с энергией $E_{\text{lab}} = 40 \text{ МэВ}$ (слева).

Физические параметры оптической модели в NRV:

$$V_0, r_{0V}, a_V, W_0, r_{0W}, a_W$$

Model Classical Optical NRV Description

Reaction

Projectile Li 6 r_0 1.25 fm R 2.271 fm

Target Li 6 r_0 1.25 fm R 2.271 fm

Energy 40 MeV lab cm E/A

Experimental data

Potential forces $V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_V}{a_V}\right)}$

Proximity b fm

Absorptive pot. $W(r) = \frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}$

Spin-orbit interaction Spin 0 1/2 V_0 0 MeV W_0 0 MeV r_0 0 fm a 0 fm

V_0^{vol}	-109.5	MeV	r_0^{vol}	0.663	fm	a^{vol}	0.811	fm
V_0^{sur}		MeV	r_0^{sur}		fm	a^{sur}		fm
r_0^{coul}	0.649	fm						
N_{Re}			N_{Im}					
W_0^{vol}	-58.219	MeV	r_0^{vol}	0.766	fm	a^{vol}	0.884	fm
W_0^{sur}		MeV	r_0^{sur}		fm	a^{sur}		fm

$$R_V = r_{0,V} A^{1/3}, R_W = r_{0,W} A^{1/3}$$

Вычислительные параметры оптической модели в NRV

Integration parameters			Default values of int.parameters			for classical model		
Initial angle	20	deg.	Partial waves:			b_1	0	fm
Maximal angle	100	deg.	Sum from L_{out}	0	R_{max}	16.05	fm	b_{max}
Step	1	deg.	to L_{max}	26	Integration step	0.17	fm	N_{traj}
								100

Calculate

Fitted parameters
 It is better to run first without fitting and use the option "dependence on..." (in the window of cross section) to find a sensitivity of the cross section to a given parameter

Real part of Optical Potential

<input checked="" type="checkbox"/> Depth of Real Vol.	<input type="checkbox"/> Depth of Real Surf.
<input checked="" type="checkbox"/> Radius of Real Vol.	<input type="checkbox"/> Radius of Real Surf.
<input checked="" type="checkbox"/> Diffuseness of Re.Vol.	<input type="checkbox"/> Diffus. of Re.Surf.

Spin-Orbital Interaction

<input type="checkbox"/> Real part	<input type="checkbox"/> Radius
<input type="checkbox"/> Imaginary part	<input type="checkbox"/> Diffuseness

Imaginary part of Optical Potential

<input checked="" type="checkbox"/> Depth of Imag. Vol.	<input type="checkbox"/> Depth of Imag. Surf.
<input checked="" type="checkbox"/> Radius of Imag. Vol.	<input type="checkbox"/> Radius of Imag. Surf.
<input type="checkbox"/> Diffuseness of Im.Vol.	<input type="checkbox"/> Diffus. of Im.Surf.

Coulomb Interaction

<input type="checkbox"/> Radius of the Coulomb Potential
--

Folding potential

<input type="checkbox"/> N_{Re}	<input type="checkbox"/> N_{Im}
-----------------------------------	-----------------------------------

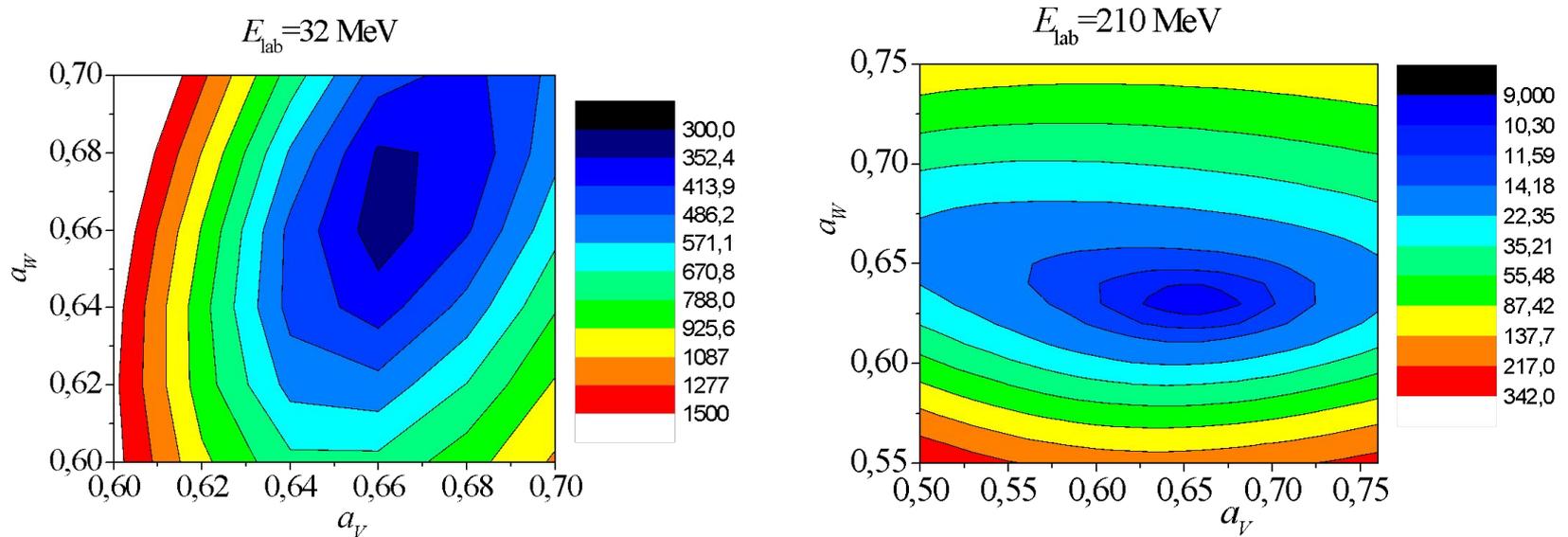
No fit Maximal number of fit steps Stop, when change is less than %

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{\left[\frac{d\sigma^{theor}}{d\Omega}(\theta_i) - \frac{d\sigma^{exp}}{d\Omega}(\theta_i) \right]^2}{[\delta\sigma_i]^2}, \quad \text{где } \delta\sigma_i - \text{ошибки измерения дифференциального сечения}$$

Для поиска минимума среднеквадратичного отклонения результатов расчета от экспериментальных данных можно варьировать лишь не более 5 параметров. В случае объемных потенциалов Вудса-Саксона (WS Volume) не более 5-и из 6-и: $V_0, r_{0V}, a_V, W_0, r_{0W}, a_W$.

Рельеф и минимумы среднеквадратичного отклонения теории от эксперимента в пространстве перемен $V_0, r_{0V}, a_V, W_0, r_{0W}, a_W$ для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^{28}\text{Si}$

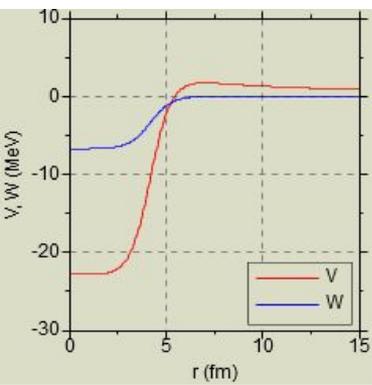
На плоскости a_V, a_W рельеф с “хорошим” минимумом (нет проблем)



Значения a_V, a_W однозначно соответствуют эффективной усредненной толщине поверхностного слоя двух сталкивающихся ядер.

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_V}{a_V}\right)} \quad W(r) = \frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}$$

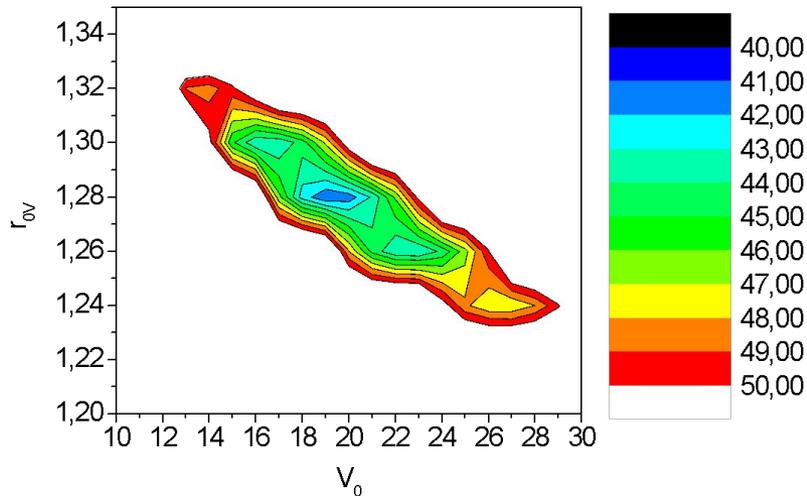
Рельеф и минимумы среднеквадратичного отклонения теории от эксперимента в пространстве перемен $V_0, r_{0V}, a_V, W_0, r_{0W}, a_W$ для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^{28}\text{Si}$



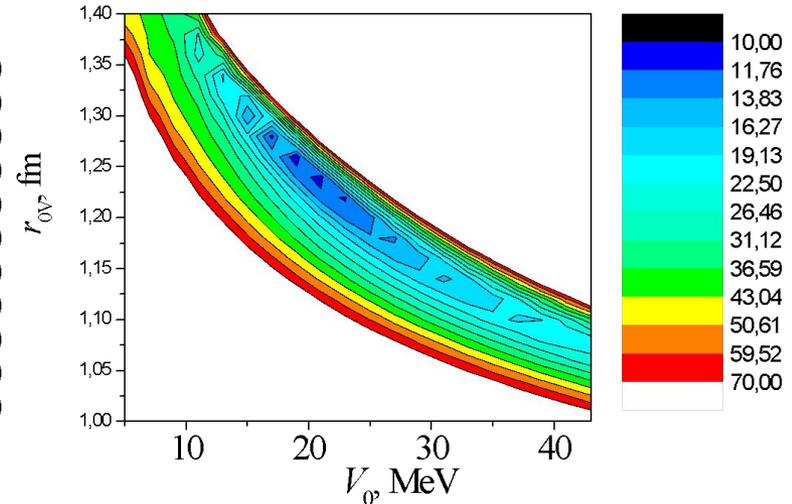
$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_V}{a_V}\right)}$$

На плоскости V_0, r_{0V} рельеф овражный (проблема 1)

$E_{\text{lab}} = 32 \text{ MeV}$

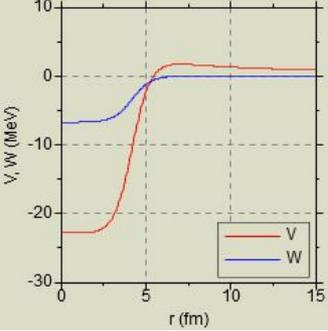


$E_{\text{lab}} = 210 \text{ MeV}$



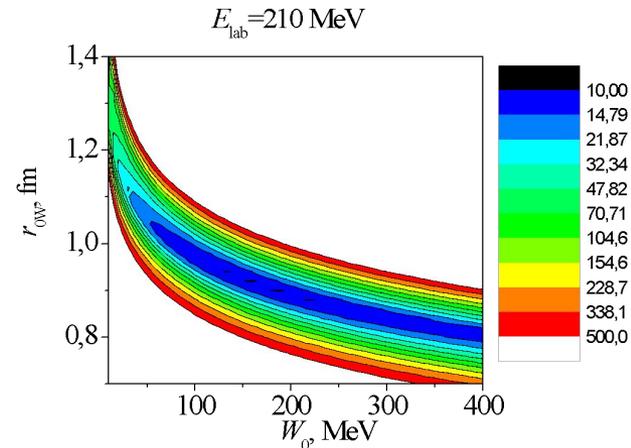
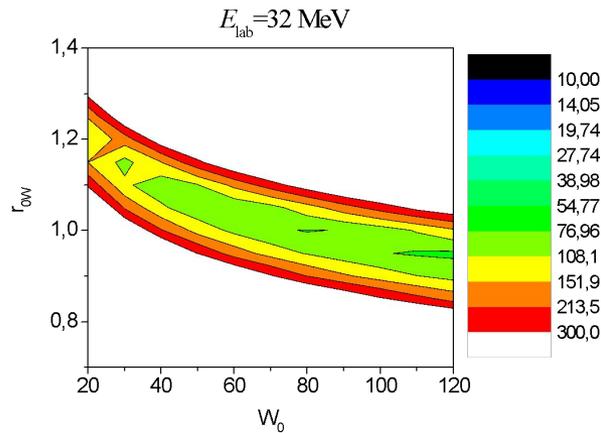
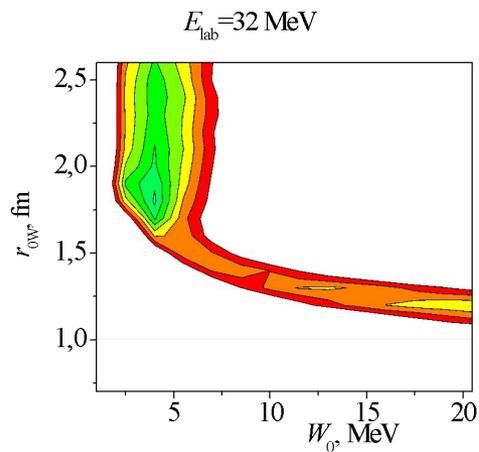
Значения V_0, r_{0V} вместе определяют форму, высоту и положение кулоновского барьера. По-отдельности они неоднозначны. V_0 соответствует глубине потенциальной ямы при совмещении сталкивающихся ядер, этого в действительности не происходит из-за несжимаемости ядерной материи.

Рельеф и минимумы среднеквадратичного отклонения теории от эксперимента в пространстве переменных $V_0, r_{0V}, a_V, W_0, r_{0W}, a_W$ для упругого рассеяния ${}^6\text{Li}+{}^{28}\text{Si}$



$$W(r) = \frac{W_0}{1 + \exp\left(\frac{r - R_W}{a_W}\right)}$$

На плоскости W_0, r_{0W} рельеф овражный (проблема 2)



Значения W_0, r_{0W} вместе определяют границы области неупругих процессов и их вероятности. По-отдельности они неоднозначны.

Проблемы 1 и 2 могут привести к неоднозначности определения параметров оптического потенциала и нефизической зависимости их от энергии.

Литература

1. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика. – М. Наука. 1971.
2. Фрауэнфельдер, Г. Субатомная физика. /Г. Фрауэнфельдер, Э. Хэнли. – М.: Мир. 1979.
3. Nuclear Reaction Video. База знаний по низкоэнергетическим ядерным реакциям.
4. <http://nrv.jinr.ru/nrv/>.
5. Н.Мотт, Г.Месси. Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969,.

Вопрос 9.

- Стационарная теория возмущений в отсутствие вырождения.
- Стационарная теория возмущений при наличии вырождения.
- Эффект Зеемана.
- Эффект Штарка.

Стационарная теория возмущений в отсутствие вырождения

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}; \quad \hat{H}_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}; \quad (\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi$$

Формулы 12

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}; \quad (E - E_k^{(0)}) c_k = \sum_m V_{km} c_m; \quad V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq$$

Поправки к энергии первого порядка в невырожденном случае

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad c_k = \delta_{kn} + c_k^{(1)}; \quad \text{for } k = n: \quad E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq$$

$$\text{for } k \neq n: \quad c_k^{(1)} = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}; \quad c_n^{(1)} = 0; \quad \psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

Условие применимости поправки к энергии первого порядка

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|; \quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}; \quad E_0^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} < 0$$

Стационарная теория возмущений при наличии вырождения

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}; \quad \hat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}; \quad \hat{H}_0 \psi_{n'}^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_{n'}^{(0)}, \dots$$

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V} \right) \psi = E \psi$$

Формулы 12

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^{(0)}; \quad \left(E - E_k^{(0)} \right) c_k = \sum_m V_{km} c_m; \quad V_{km} = \int \psi_k^{(0)*} \hat{V} \psi_m^{(0)} dq$$

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} \text{ для } c_n = c_n^{(0)}, c_{n'} = c_{n'}^{(0)}, \dots; \quad 0, \text{ для } E_n^{(0)} = E_{n'}^{(0)} = \dots \quad c_k = \quad E_k^{(0)} \neq E_n^{(0)}$$

секулярное уравнение

$$E_n^{(1)} c_n = \sum_{n'} V_{nn'} c_{n'}^{(0)}; \quad \sum_{n'} \left(V_{nn'} - E_n^{(1)} \delta_{nn'} \right) c_{n'}^{(0)} = 0; \quad \left| V_{nn'} - E_n^{(1)} \delta_{nn'} \right| = 0$$

Поправки к энергии первого порядка в невырожденном и вырожденном случаях

Эффект Зеемана – расщепление спектральных линий и уровней энергии атома в однородном магнитном поле (без учета спина)

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + q\Phi; \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + U; \quad \vec{A} = \frac{1}{2} [\nabla \times \vec{r}], \quad q = -e$$

$$\hat{H} = H_0 + \frac{e}{mc} \sum_a \vec{A}_a \cdot \vec{p}_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \vec{A}_a^2 \approx \hat{H}_0 + \frac{e}{2mc} \nabla \times \sum_a [\vec{r}_a \cdot \vec{p}_a] = \hat{H}_0 + \mu_B \vec{L} \cdot \vec{H},$$

$$\hat{V} = \mu_B \vec{L} \cdot \vec{H} = \mu_B H \hat{L}_z, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

Магнетон Бора
оператор взаимодействия



$$\Psi = \sum_{M=-L}^L c_M \Psi_M^{(0)}$$

Поправка к энергии состояния с орбитальным моментом L по формуле для наличия вырождения по орбитальному магнитному квантовому числу $M = -L, \dots, L$

$$V_{M'M} = \int \Psi_{LM'}^{(0)*} \hat{V} \Psi_{LM}^{(0)} dq = \mu_B H \int \Psi_{LM'}^{(0)*} \hat{L}_z \Psi_{LM}^{(0)} dq = \mu_B H \int \Psi_{LM'}^{(0)*} M \Psi_{LM}^{(0)} dq$$

$$= \mu_B H M \delta_{M'M} \quad \left| V_{M'M} - E_M^{(1)} \delta_{M'M} \right| = 0 \quad \left| \mu_B H M \delta_{M'M} - E_M^{(1)} \delta_{M'M} \right| = 0$$

Формулы 13

Поправка к энергии по формуле для отсутствия вырождения

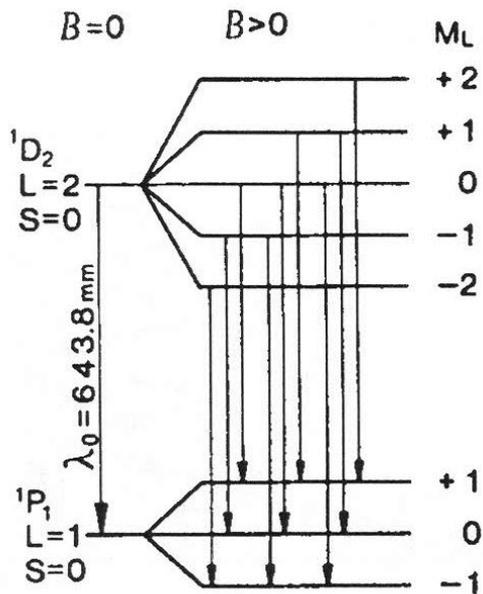
$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad E_n^{(1)} = \Delta E = \mu_B |\vec{H}| \bar{L}_z = \mu_B H M_L; \quad M_L = -L, \dots, L, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$$

расщепление уровней в 1 порядке теории возмущений.

$$L = 0: E_n^{(1)} = 0, \quad \Delta E = \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \vec{A}_a^2 = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \overline{[\nabla \times \vec{r}_a]^2} = \frac{e^2}{12mc^2} H^2 \sum_a \overline{r_a^2};$$

Эффект Зеемана – расщепление спектральных линий и уровней энергии атома в однородном магнитном поле (без учета спина)

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad E_n^{(1)} = \Delta E = \mu_B H M_L; \quad M_L = -L, \dots, L$$



расщепление уровней в 1 порядке теории возмущений.

Расщепление синглетных энергетических уровней атома кадмия на $2L+1$ подуровней в магнитном поле и переходы, разрешенные правилами отбора $\Delta M_L = 0, \pm 1$

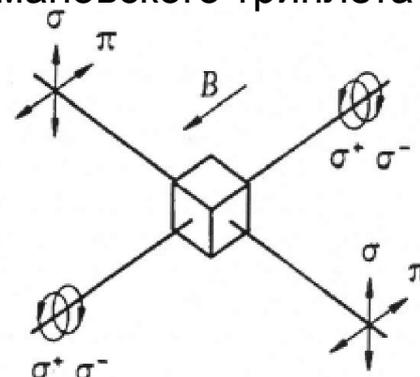
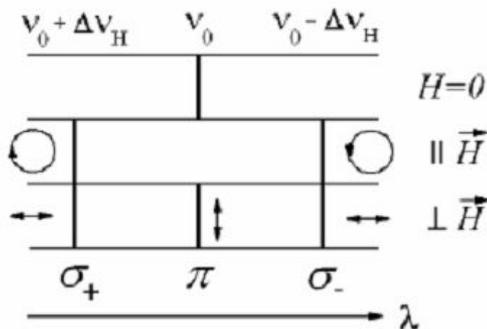
Разность энергий между соседними подуровнями одинакова для всех синглетных (с нулевым спином) уровней

Расщепление в магнитном поле линий спектра на три компоненты называется *простым эффектом Зеемана*

Рис. к формулам 13

$\Delta M_L = -1 \quad 0 \quad +1$
 $\sigma \quad \pi \quad \sigma$

поляризация π - и σ -компонент зеемановского триплета

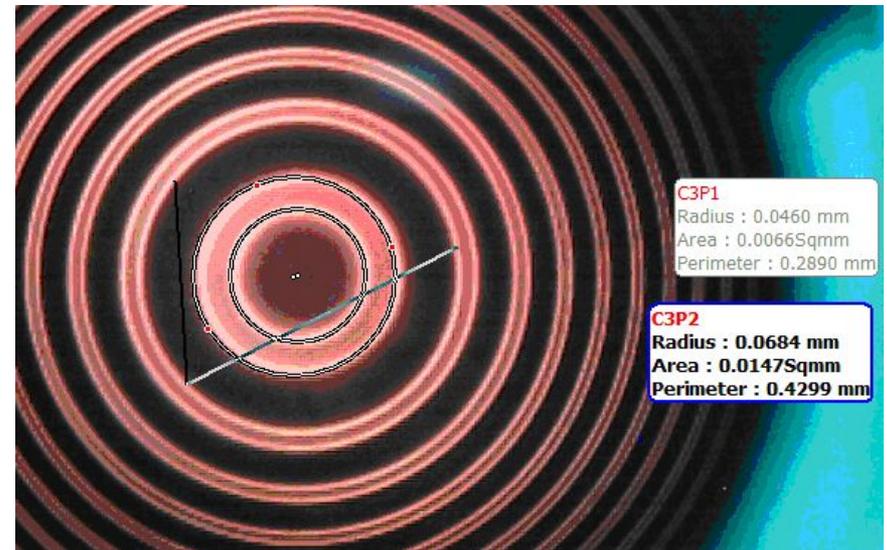
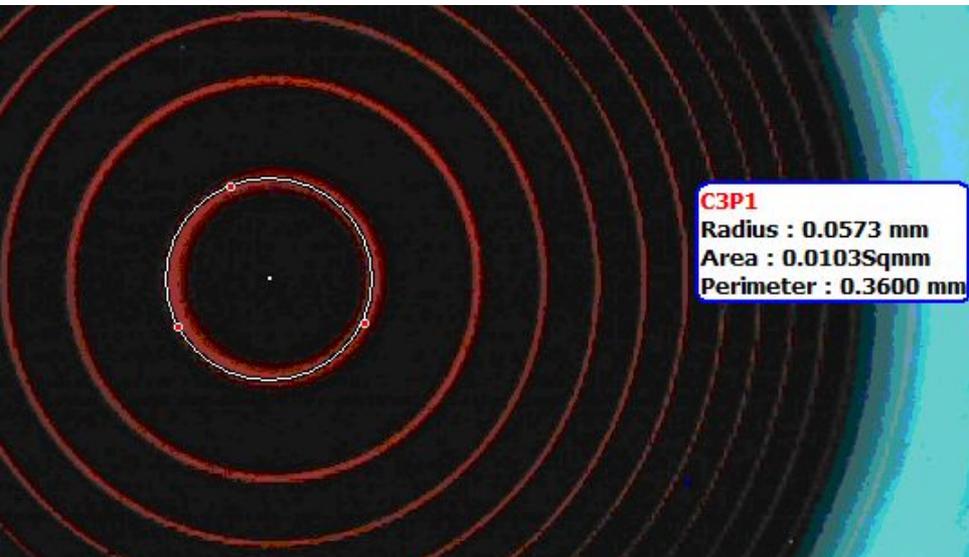


Простой эффект Зеемана (без учета спина) для $S=0$ в слабом поле или с учетом спина в сильном поле



Простой триплет

Эффект Зеемана – расщепление красной спектральной линии атома кадмия в однородном магнитном поле (без учета спина)



Изображение интерференционной картины на экране компьютера с без магнитного поля. Использован интерферометр Фабри-Перо.

Изображение интерференционной картины на экране компьютера для простого “поперечного” эффекта Зеемана

Наблюдения спектров излучения чаще всего производят по нормали к направлению магнитного поля (“поперечный” эффект Зеемана) или по направлению поля (“продольный” эффект Зеемана). При продольном эффекте Зеемана видны только смещенные σ -компоненты зеемановского триплета, которым соответствует циркулярно поляризованный свет. Двум направлениям круговой поляризации (по и против часовой стрелки) соответствуют два возможных значения проекции момента импульса фотона на направление движения и два значения проекции спина фотона. При наблюдении поперек поля эти линии оказываются линейно поляризованными. Вектор напряженности электрического поля E колеблется перпендикулярно направлению магнитного поля. Несмещенная π -компонента не видна при наблюдении вдоль поля, а при наблюдении поперек поля линейно поляризована, причем вектор E колеблется вдоль направления магнитного поля.

Эффект Штарка - расщепление спектральных линий и уровней энергии в однородном электрическом поле

$$V = -\vec{E}d = -|\vec{E}|d_z$$

1. Атом водорода: линейный эффект Штарка

$$E_n^{(1)}c_n = \sum_{n'} V_{nn'}c_{n'}^{(0)}; \quad \sum_{n'} (V_{nn'} - E_n^{(1)}\delta_{nn'})c_{n'}^{(0)} = 0; \quad |V_{nn'} - E_n^{(1)}\delta_{nn'}| = 0$$

2. Сложный атом: квадратичный эффект Штарка

$$E = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}; \quad c_k = \delta_{kn} + c_k^{(1)}; \quad k = n: E_n^{(1)} = V_{nn} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{V} \psi_n^{(0)} dq = 0$$

$$|V_{mn}| \ll |E_n^{(0)} - E_k^{(0)}|; \quad E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}; \quad E_0^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} < 0$$

Эффект Штарка:

1. Линейный у атома водорода и водородоподобных атомов (в слабых полях), связан с вырождением уровней энергии по орбитальному квантовому числу в кулоновском поле. Средний дипольный момент таких атомов не равен нулю. Энергия подуровней зависит от главного квантового числа, орбитального квантового числа и модуля магнитного орбитального квантового числа. Например состояние с $n=2$ расщепляется на 3 подуровня, в общем случае на $2n-1$ подуровень.

2. Квадратичный у атома водорода и водородоподобных атомов в сильных полях, у многоэлектронных атомов с нулевым средним дипольным моментом.

Литература

1. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. В 5 Т. Т 5: Атомная и ядерная физика: учеб. пособие– М.: Физматлит, 2002
2. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика. – М. Наука. 1971.

Вопрос 10

- Уравнение Дирака.
- Квазирелятивистское приближение.
- Спин-орбитальное взаимодействие.
- Тонкая структура спектра атома водорода и атомов щелочных элементов.

Уравнение Дирака

Формулы 14

для свободного движения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (c\alpha \hat{p} + mc^2 \beta) \Psi; \Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}; \phi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}; \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix};$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}; \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}; \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

Состояния с определенным значением импульса p и энергии ε

$$\begin{cases} (mc^2 - \varepsilon)\phi + c\sigma p\chi = 0 \\ -c\sigma p\phi + (mc^2 + \varepsilon)\chi = 0 \end{cases}; \begin{vmatrix} mc^2 - \varepsilon & c\sigma p \\ -c\sigma p & mc^2 + \varepsilon \end{vmatrix} = 0; \varepsilon = \pm c\sqrt{p^2 + m^2 c^2}$$

положительные и отрицательные "частоты"

Операторы проекций внутреннего углового момента (спинового момента)

$$\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \sigma \quad \text{Оператор спина} \quad \hat{s} = \frac{\hbar}{2} \sigma = (\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3)$$

Движение в электромагнитном поле $\hat{p} \rightarrow \hat{p} - \frac{q}{c} A; \varepsilon \rightarrow \varepsilon - qA_0$

$$\begin{cases} c\sigma p\chi = (\varepsilon - mc^2)\phi \\ c\sigma p\phi = (\varepsilon + mc^2)\chi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c\sigma \left(\hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \chi = (\varepsilon - qA_0 - mc^2)\phi \\ c\sigma \left(\hat{p} - \frac{q}{c} A \right) \phi = (\varepsilon - qA_0 + mc^2)\chi \end{cases}$$

для электрона

$$q = -e < 0 \\ qA_0 = -e^2/r$$

для атома водорода

$$\begin{cases} c\sigma p\chi = (\varepsilon - mc^2 + e^2/r)\phi \\ c\sigma p\phi = (\varepsilon + mc^2 + e^2/r)\chi \end{cases}$$

Оператор полного момента в центральном поле

$$\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$$

Шаровые спиноры – собственные функции

$$\hat{j}^2, \hat{l}^2, \hat{j}_z^2$$

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(r)\Omega_{j,l,m} \\ (-1)^{\frac{1+l-l'}{2}} g(r)\Omega_{j,l',m} \end{pmatrix}; \quad \begin{matrix} l = j \pm 1/2; \\ l' = 2j - l; \end{matrix} \quad \Omega_{l+1/2,l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}$$

$$\Omega_{l-1/2,l,m} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m-1/2} \\ \sqrt{\frac{j+m+1/2}{2l+1}} Y_{l,m+1/2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} f' + \frac{1+\kappa}{r} f - \frac{1}{c} (\varepsilon + mc^2 + e^2/r) g = 0 \\ g' + \frac{1-\kappa}{r} g + \frac{1}{c} (\varepsilon - mc^2 + e^2/r) f = 0 \end{cases} \begin{cases} f = \sqrt{\varepsilon + mc^2} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} (Q_1 + Q_2) \\ g = -\sqrt{mc^2 - \varepsilon} \rho^{\gamma-1} e^{-\rho/2} (Q_1 - Q_2) = 0 \end{cases}$$

$$\kappa = \begin{cases} -(j+1/2) = -(l+1), j = l+1/2; \\ j+1/2 = l, j = l-1/2; \end{cases}$$

$$n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, \kappa < 0, j = l+1/2; \\ 1, 2, 3, \dots, \kappa \geq 0, j = l-1/2; \end{cases}$$

$$n_r = \frac{\alpha \varepsilon}{c \lambda(\varepsilon)} - \gamma; \quad \text{целое положительное число} \quad \mathbf{53}$$

Решения уравнения Дирака для атома водорода: уровни энергии

$$\kappa = \begin{cases} -(j+1/2) = -(l+1), & j = l+1/2; \\ j+1/2 = l, & j = l-1/2; \end{cases} \quad n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, & \kappa < 0, j = l+1/2; \\ 1, 2, 3, \dots, & \kappa \geq 0, j = l-1/2; \end{cases} \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

СИ Гауссова система единиц

точное выражение

$$+\epsilon = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left(n_r + \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2}\right)^2}}} = mc^2 + E(n_r, j) \dots$$

приближенное выражение

$$E(n, j) = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{2a_A} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]; \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

$$m := 9.10953 \quad c := 3 \quad \frac{m \cdot c^2}{1.6022} = 511.71 \quad \epsilon_0 := 8.85 \quad \hbar := 1.055 \quad e := 1.602 \quad \text{Alpha} := \frac{e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar \cdot c}$$

$$mc^2 := 511.71 \cdot 10^3 \quad \alpha := \frac{1}{137} \quad \frac{1}{\text{Alpha}} = 137.152 \quad \text{Alpha} = 7.291 \times 10^{-3}$$

$$\epsilon(n, j) := \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\left[n + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \alpha^2} \right]^2}}} - 1 \right] \cdot mc^2 \quad \epsilon_S(n) := \frac{-13.6}{n^2}$$

$$\begin{array}{cccc} \epsilon_S(1) = -13.6 & \epsilon_S(2) = -3.4 & \epsilon_S(3) = -1.511 & \epsilon_S(4) = -0.85 \\ 1s & l=0, j=1/2 \quad 2s & 3s & 4s \end{array}$$

$$\begin{array}{cccc} \epsilon\left(0, \frac{1}{2}\right) = -13.632 & \epsilon\left(1, \frac{1}{2}\right) = -3.408 & \epsilon\left(2, \frac{1}{2}\right) = -1.515 & \epsilon\left(3, \frac{1}{2}\right) = -0.852 \\ 1s & l=1, j=1/2 \quad 2p1/2 & 3p1/2 & 4p1/2 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc} l=1, j=3/2 \quad 2p3/2 & & \\ \epsilon\left(0, \frac{3}{2}\right) = -3.408 & \epsilon\left(1, \frac{3}{2}\right) = -1.515 & \epsilon\left(2, \frac{3}{2}\right) = -0.852 \\ & l=2, j=3/2 \quad 3p3/2 & 4p3/2 \\ & \epsilon\left(0, \frac{5}{2}\right) = -1.515 & \epsilon\left(1, \frac{5}{2}\right) = -0.852 \\ & 3d3/2 & 4d3/2 \end{array}$$

Решение уравнения Дирака для атома водорода: энергии

$$\kappa = \begin{cases} -(j+1/2) = -(l+1), j = l+1/2; \\ j+1/2 = l, j = l-1/2; \end{cases} n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, \kappa < 0, j = l+1/2; \\ 1, 2, 3, \dots, \kappa \geq 0, j = l-1/2; \end{cases}$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ (СИ)} \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137} \text{ (Гауссова)}$$

$$E(n_r, j) = \varepsilon - mc^2 = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + \sqrt{\kappa^2 - \alpha^2})^2}}} - 1 \right) = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa| \sqrt{1 - \alpha^2/\kappa^2})^2}}} - 1 \right) \approx$$

точное
выражение

приближенные
выражения

$$\approx mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa| - \alpha^2/(2|\kappa|)})^2}}} - 1 \right) \approx mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)^2 (1 - \alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|)))^2}}} - 1 \right) \approx$$

$$\approx mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)^2} (1 + 2\alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|)))}} - 1 \right) \approx$$

$$\approx mc^2 \left[-\frac{\alpha^2}{2(n_r + |\kappa|)^2} (1 + 2\alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|))) + \frac{1 \cdot 2}{3 \cdot 4} \left(\frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)^2} (1 + 2\alpha^2/(2|\kappa|(n_r + |\kappa|))) \right)^2 \right] \approx$$

$$\approx \frac{mc^2 \alpha^2}{2(n_r + |\kappa|)^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2}{(n_r + |\kappa|)} \left[\frac{1}{|\kappa|} - \frac{3}{4(n_r + |\kappa|)} \right] \right\}; \quad n_r + |\kappa| = n; \quad |\kappa| = j + \frac{1}{2}; \quad mc^2 \alpha^2 = \frac{me^4}{\hbar^2}$$

приближенное выражение

Энергия уровней атома водорода с учетом тонкой структуры

$$E(n, j) = -\frac{1}{n^2} \frac{e^2}{2a_B} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]; \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Формулы 15

55

Решение уравнения Дирака для водородоподобного атома : энергия основного состояния

$$\begin{cases} c\sigma p\chi = (\varepsilon - mc^2 + Ze^2/r)\phi \\ c\sigma p\phi = (\varepsilon + mc^2 + Ze^2/r)\chi \end{cases}$$

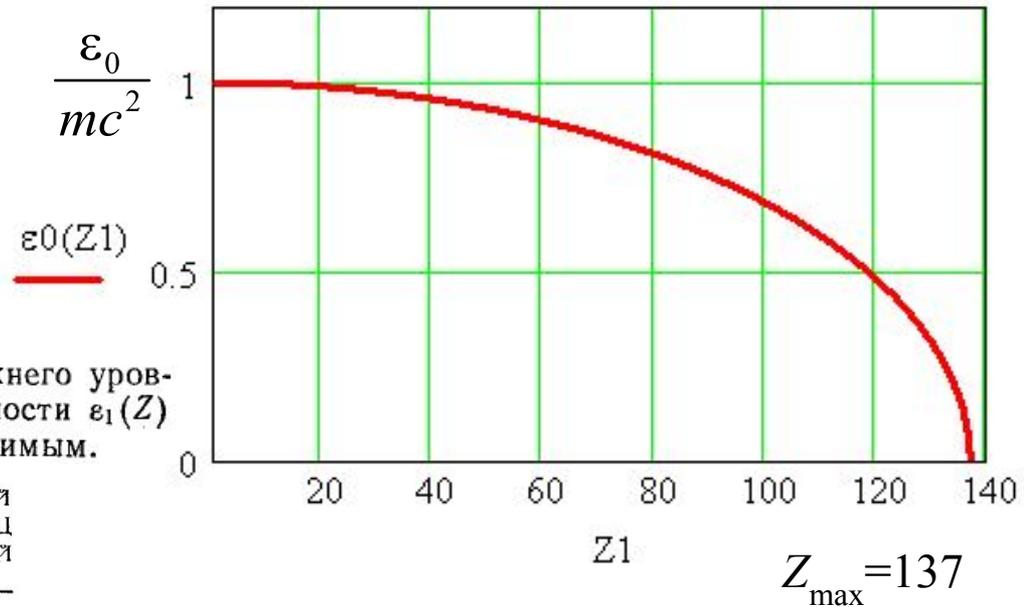
$$Z\alpha = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx \frac{Z}{137} \text{ СИ} \quad Z\alpha = Z \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{Z}{137} \text{ Гауссова система единиц}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{\left(n_0 + \sqrt{\kappa_0^2 - Z^2\alpha^2}\right)^2}}} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2\alpha^2}{1 - Z^2\alpha^2}}} = mc^2 \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}$$

$n_0 = 0, \kappa_0 = -1$

$\varepsilon_0(Z) := \sqrt{1 - \alpha^2 \cdot Z^2}$ +

Чисто кулоново поле можно рассматривать в теории Дирака лишь при $Z\alpha < 1$, т.е. $Z < 137$.



В «необрезанном» кулоновом поле энергия ε_1 нижнего уровня обращается при $Z\alpha = 1$ в нуль и кривая зависимости $\varepsilon_1(Z)$ обрывается — при $Z\alpha > 1$ уровень ε_1 становится мнимым.

В. Б. БЕРЕСТЕЦКИЙ
Е. М. ЛИФШИЦ
Л. П. ПИТАЕВСКИЙ

ТОМ IV

КВАНТОВАЯ
ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

Решение уравнения Дирака для водородоподобного атома с ядром конечного размера: энергия основного состояния

Остановимся на качественном описании ситуации, возникающей при $Z > 137$. Снова, чтобы избежать неопределенности в граничном условии при $r = 0$, следует рассматривать потенциал, обрезанный на некотором расстоянии r_0 (И. Я. Померанчук, Я. А. Смородинский, 1945). Это имеет не только формальный, но и прямой физический смысл. Заряд $Z > 137$ фактически может быть сосредоточен только в некотором «сверхтяжелом» ядре конечного радиуса. Рассмотрим поэтому, как меняется расположение уровней с увеличением Z при заданном r_0 .

В «обрезанном» же поле, при заданном $r_0 \neq 0$, уровень ε_1 проходит через нуль лишь при некотором $Z\alpha > 1$. Но значение $\varepsilon_1 = 0$ никак не выделено физически, а при $r_0 \neq 0$ оно ничем не выделено и формально — кривая зависимости $\varepsilon_1(Z)$ здесь не обрывается. При дальнейшем увеличении Z уровни продолжают понижаться, и при некотором «критическом» значении $Z = Z_c(r_0)$ энергия ε_1 достигает границы $(-m)$ нижнего континуума уровней. Как было объяснено в предыдущем параграфе, это означает обращение в нуль энергии, требуемой для рождения свободного позитрона. Поэтому критическое значение Z_c — это максимальный заряд, которым может обладать «голое» ядро при заданном r_0 .

При $Z > Z_c$ уровень $\varepsilon_1 < -m$ и становится энергетически выгодным рождение двух электрон-позитронных пар. Позитроны уходят на бесконечность, унося кинетическую энергию $2(|\varepsilon_1| - m)$, а два электрона заполняют уровень ε_1 . В результате образуется «ион» с заполненной K -оболочкой и зарядом $Z_{эф} = Z - 2$ (С. С. Герштейн, Я. Б. Зельдович, 1969). Эта система устойчива при $Z > Z_c$, вплоть до значений Z , когда границы $-m$ достигнет следующий уровень¹⁾.

¹⁾ Так, если заряд ядра равномерно распределен в сфере радиуса $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-12}$ см, критическое значение $Z_c = 170$, а следующий уровень достигает границы $-m$ при $Z = 185$ (В. С. Попов, 1970). Подробное изложение количественной теории — см. обзорную статью Я. Б. Зельдовича и В. С. Попова (УФН. — 1971. — Т. 105. — С. 403).

Квазирелятивистское приближение.

Нерелятивистское движение в слабом электромагнитном поле $\varepsilon = E' + mc^2$; $|E' - qA_0| \ll mc^2$

$$c\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \hat{A} \right) \chi = (\varepsilon - qA_0 - mc^2) \phi \Rightarrow \left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \hat{A} \right)^2 + qA_0 - \frac{q\hat{\sigma}}{2mc} (\hat{\sigma} \mathbf{H}) \right\} \phi = E' \phi; \hat{H} = \text{rot} \hat{A}; \text{Уравнение Паули}$$

$$c\hat{\sigma} \left(\hat{p} - \frac{q}{c} \hat{A} \right) \phi = (\varepsilon - qA_0 + mc^2) \chi - \frac{q\hat{\sigma}}{2mc} (\hat{\sigma} \mathbf{H}) = -\hat{\mu} \mathbf{H} = 2\mu_B \hat{s} \mathbf{H}; \hat{\mu} = \frac{q\hat{\sigma}}{2mc} \hat{\sigma} = -\frac{e\hat{\sigma}}{2mc} \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \hat{\sigma} = -2\mu_B \hat{s}; \mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}, \hat{s} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}.$$

для электрона $q = -e < 0$

$$qA_0 = V(r)$$

μ – оператор спинового магнитного момента, s – оператор спина электрона

магнетон Бора

Движение в слабом центральном электростатическом поле $eA_0 = V(r)$

с точностью до членов порядка v^2/c^2

Формулы 16

$$\left\{ \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(r) + \hat{W}_1 + \hat{W}_2 + \hat{W}_3 \right\} \Psi = E' \Psi$$

$$E' g \phi = E' \Psi = (gH'g^{-1}) g \phi = H \Psi$$

$$\Psi = g \phi = \left(1 - \frac{\hat{p}^2}{4m^2 c^2} \right)^{1/2} \phi \approx \left(1 - \frac{\hat{p}^2}{8m^2 c^2} \right) \phi$$

$$W_1 = \frac{\hat{p}^2}{8m^2 c^2} \Delta V$$

Оператор контактного взаимодействия

В кулоновском поле $V(r) = -e^2 Z/r$

$$W_1 = \frac{\hat{p}^2}{8m^2 c^2} \Delta V = \frac{\hat{p}^2}{8m^2 c^2} 4\pi Z e^2 \delta(r)$$

$$W_2 = -\frac{[E' - V]^2}{2mc^2}$$

Поправка к оператору кинетической энергии, из-за изменения массы частицы при изменении ее скорости

$$W_3 = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \hat{\sigma} \left[(\nabla V) \hat{p} \right] = \frac{\hbar}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \left(\hat{s} \hat{L} \right), \left[\frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{n} \cdot \hat{\sigma} \cdot \hat{e}_a \cdot \hat{i}}{\hat{\sigma} \cdot \hat{e}_a \cdot \hat{i} \cdot \hat{n}} = \hat{\sigma} \right]$$

Оператор спин-орбитального взаимодействия

58

Формулы 16

Спин-орбитальное взаимодействие.

Формулы 15

где α – постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137},$$

R – постоянная Ридберга, $\hbar c R = 13.6$ эВ

Для водородоподобного атома точное решение уравнения Шредингера с учетом спин-орбитального взаимодействия приводит к выражению для энергий уровней, несколько отличному от (9.2) $\approx E(n) = -\hbar c R Z^2 / n^2$ и (9.10), (9.11)

$$E(n, j) = -\frac{\hbar c R Z^2}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \right]. \quad (9.12)$$

Приближенное вычисление (в рамках так называемой теории возмущений квантовой механики) приводят к следующему выражению для величины δE

$$E = E(n, l) + \delta E \quad \delta E(j, n, l) = \zeta(n, l) \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)], \quad (9.3)$$

где величина $\zeta(n, l) > 0$ называется постоянной расщепления

$$\zeta(n, l) = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \int_0^\infty U'(r) R_{nl}^2(r) r dr. \quad (9.4)$$

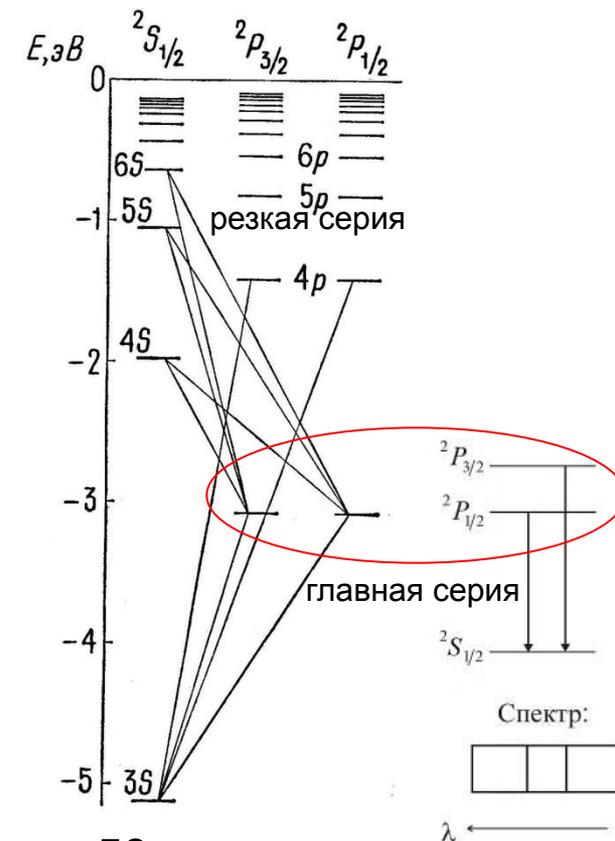
Разность энергий $\Delta E = |\delta E_1 - \delta E_2| = E(n, j_2) - E(n, j_1)$ в обоих приближениях (9.2), (9.10), (9.11) и (9.12) одинакова

$$\Delta E(n, l) = \frac{\hbar c R \alpha^2 Z^4}{n^3} \left(\frac{1}{l(l+1)(l+1/2)} \frac{l+1}{2} + \frac{1}{l(l+1)(l+1/2)} \frac{l}{2} \right) = \frac{\hbar c R \alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)}, \quad (9.13)$$

Для многоэлектронных атомов из-за экранирования поля ядра внутренними электронами разность энергий ΔE для валентных электронов возрастает с ростом атомного номера Z приблизительно пропорционально Z^γ , $1.5 < \gamma < 2$, см. табл. 9.2. Поэтому с увеличением атомного номера возрастает и разность длин волн дублетов (см. табл. 9.1). Формулы (9.2)-(9.13) применимы, пока расщепление соседних уровней гораздо меньше расстояния между ними.

Щелочной элемент	Z	l	ΔE , эВ
Натрий, Na	11	1	0,002
Калий, K	19	1	0,007
Цезий, Cs	55	1	0,07

Водород $\Delta E = 4 \cdot 10^{-5}$ эВ



59

Схема образования дублетных линий главной и резкой серий натрия

Спин-орбитальное взаимодействие

Причиной дублетной (тонкой) структуры спектральных линий щелочных элементов и водорода является дублетная тонкая структура части их энергетических уровней. Схема тонкой структуры уровней двух щелочных элементов – натрия и калия, поясняющая образование дублетов главной и резкой серий показана на рис. 9.1. Тонкая структура спектральных линий была открыта и исследована Майкельсоном*1.

Тонкая структура уровней энергии (называемая также мультиплетным расщеплением) – расщепление уровней энергии (термов) электронов в атомах (см. также работу 9), молекулах (см. работу 13), кристаллах обусловлено, главным образом, спин-орбитальным взаимодействием. Спин-орбитальное взаимодействие в атомах, молекулах, кристаллах является проявлением электромагнитного взаимодействия. В релятивистской квантовой теории Дирака*2 его рассматривают как взаимодействие между *спиновым* и *орбитальным магнитными моментами* электрона. Первый является собственным магнитным моментом, обусловленным наличием у электрона собственного механического момента – *спина* $s=1/2$, не связанного с движением электрона в пространстве. Второй магнитный момент связан с орбитальным движением (током) электрона.

Сложение орбитального механического момента (момента импульса) электрона и его спинового момента приводит к новому квантовому числу электрона в атоме – числу j полного момента. В результате сложения орбитального момента $l \neq 0$ и спина $s=1/2$ квантовое число полного момента может принимать два значения j_1 и j_2

$$j_1 = l - 1/2, \quad j_2 = l + 1/2. \quad (9.1)$$

При $l=0$ в отсутствие орбитального момента полный момент равен спиновому, а число j имеет единственное значение $j=1/2$.

Каждый энергетический уровень (кроме s-уровней с квантовым числом $l=0$) с энергией $E = E(n, l)$, зависящей от главного квантового числа n и орбитального квантового числа l , расщепляется на два близких подуровня с энергиями

$$E_1 = E(n, l) + \delta E_1, \quad E_2 = E(n, l) + \delta E_2. \quad (9.2)$$

Поправка к энергии состояний электрона зависит от j : $\delta E = \delta E(j, n, l)$.

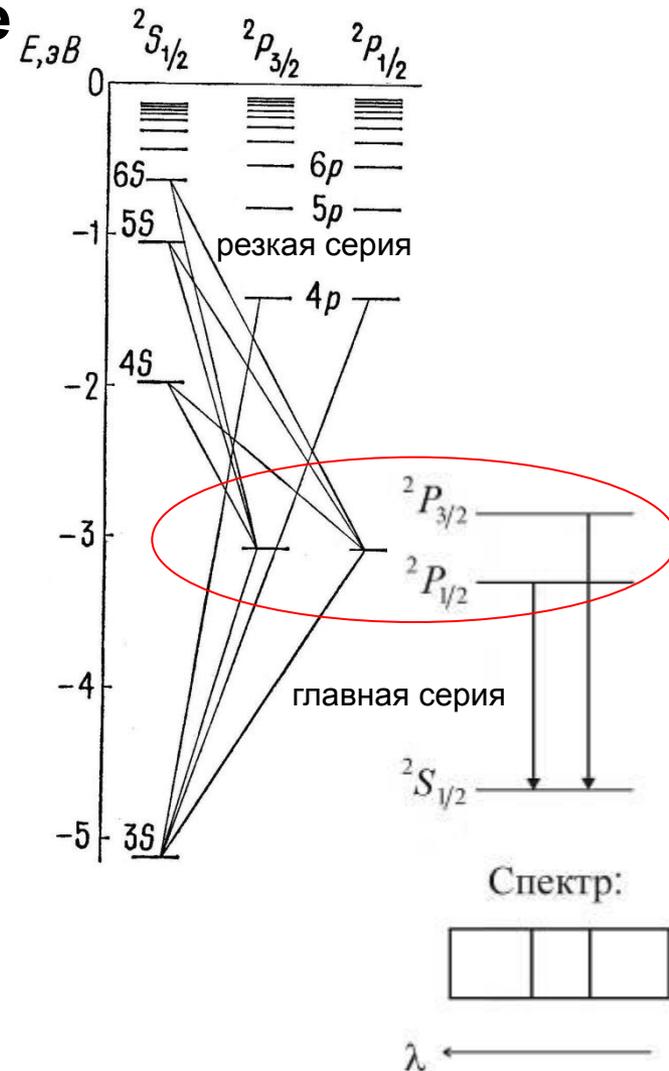
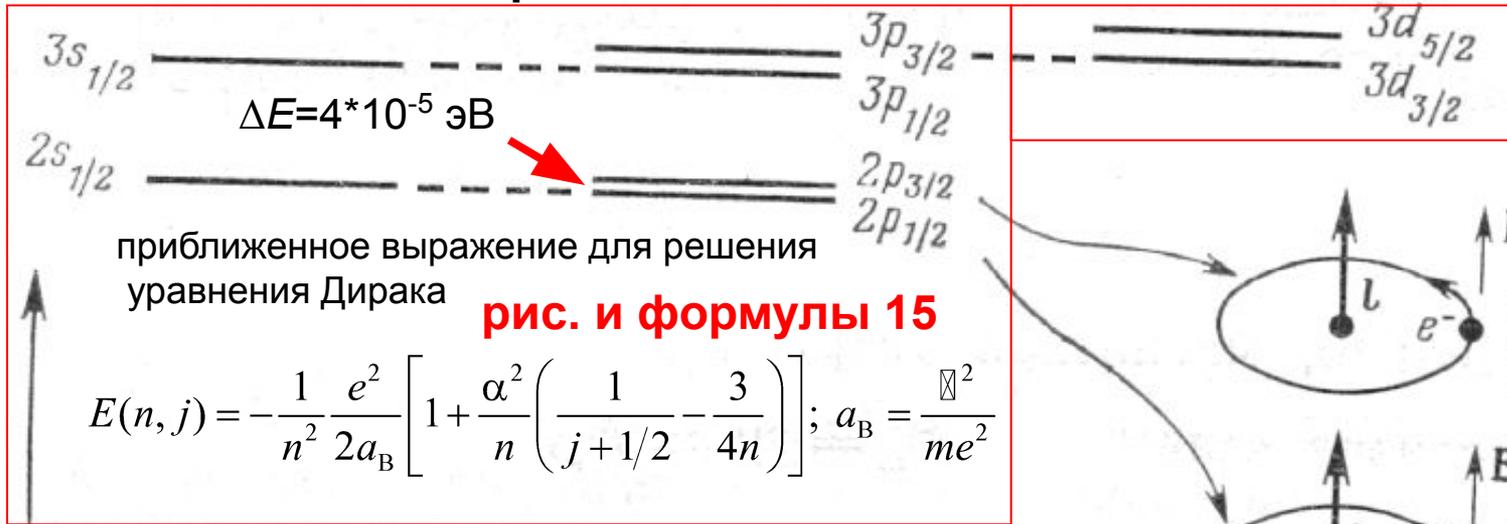
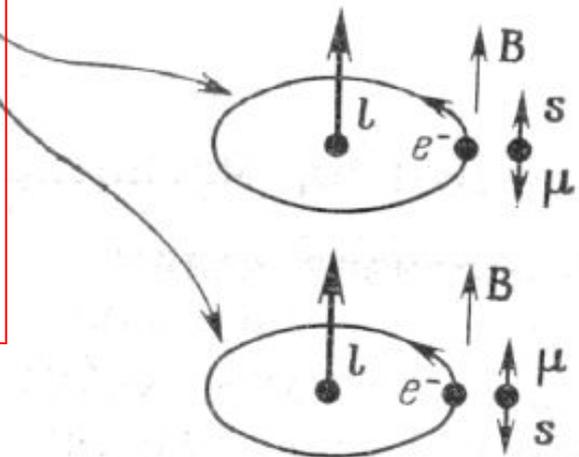


Схема образования дублетных линий главной и резкой серий натрия

Тонкая структура спектра атома водорода – результат спин-орбитального взаимодействия

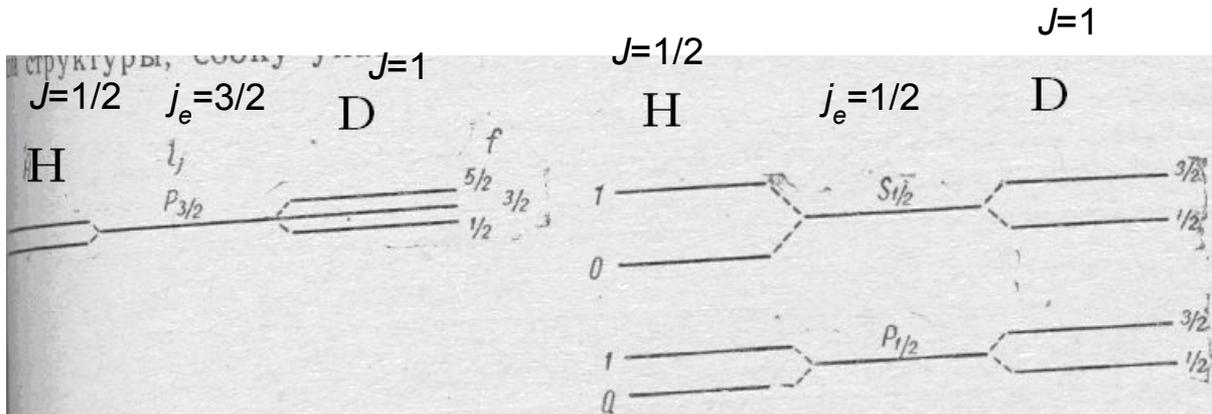
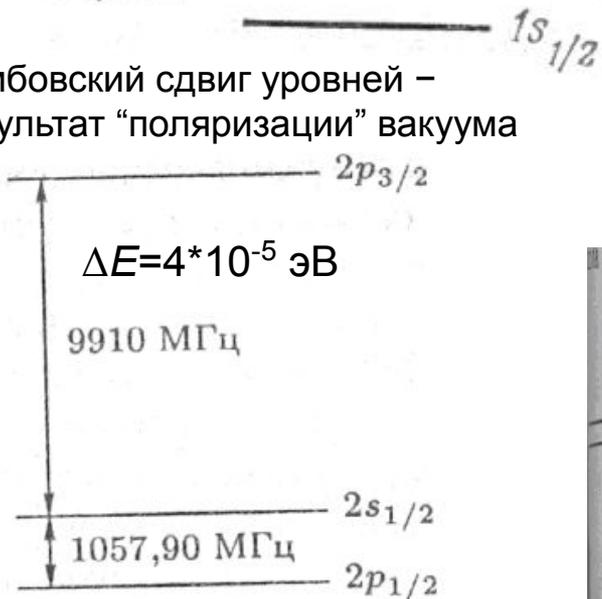


Полная энергия



Лэмбовский сдвиг уровней – результат “поляризации” вакуума

Сверхтонкая структура – результат сложения электронного (j_e) и ядерного (J) моментов $f = j_e + J, j_e + J - 1, \dots |j_e - J|$



Литература

1. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. В 5 Т. Т 5: Атомная и ядерная физика: учеб. пособие– М.: Физматлит, 2002
2. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика. – М.: Наука. 1971.
3. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Наука. 1971.
4. Карякин Н.И., Быстров К.Н., Киреев П.С. Краткий справочник по физике. – М.: Высшая школа. 1969.

Вопрос 11.

- Системы тождественных частиц.
- Бозоны и фермионы.
- Принцип Паули.
- Атом гелия.

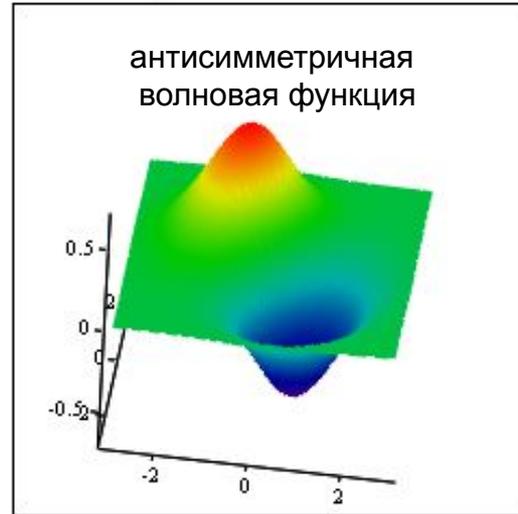
Принцип неразличимости одинаковых частиц в квантовой механике

В силу принципа неопределенности невозможно проследить за каждой из одинаковых частиц и различать их.

Волновая функция системы двух частиц $\Psi(x,y)$ либо антисимметрична $\Psi_A(x,y) = -\Psi_A(y,x)$, либо симметрична $\Psi_S(x,y) = \Psi_S(y,x)$ в силу того, что $|\Psi(x,y)|^2 = |\Psi(y,x)|^2$, $\Psi(x,y) = C\Psi(y,x) = C^2\Psi(x,y)$ и $C^2=1$, $C=\pm 1$.

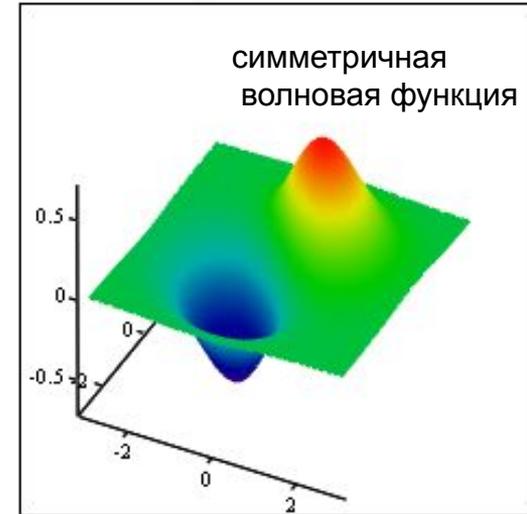
$$fa(x,y) := f0(x) \cdot f1(y) - f0(y) \cdot f1(x)$$

$$fan(x,y) := \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot fa(x,y)$$

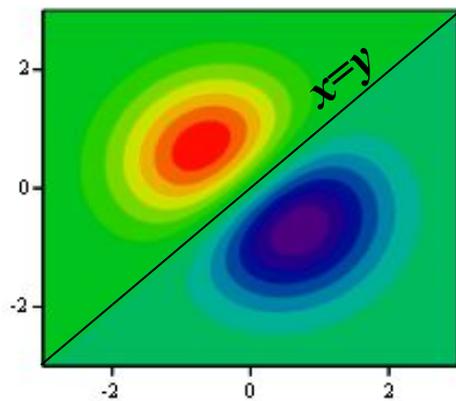


$$fs(x,y) := (f0(x) \cdot f1(y) + f0(y) \cdot f1(x))$$

$$fsn(x,y) := \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot fs(x,y)$$



fan

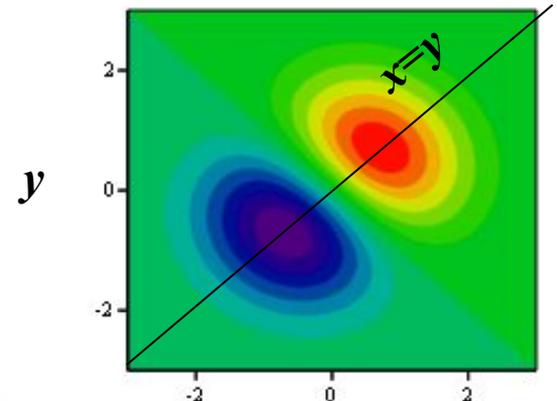


fan

x

+

fsn



fsn

x

y

Системы тождественных частиц

Глава VI

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

§ 45. Принцип неразличимости одинаковых частиц

В классической механике одинаковые частицы (скажем, электроны), несмотря на тождественность их физических свойств, не теряют все же своей «индивидуальности»: можно представить себе частицы, входящие в состав данной физической системы, в некоторый момент времени «перенумерованными» и в дальнейшем следить за движением каждой из них по своей траектории; тогда в любой момент времени частицы можно будет идентифицировать.

В квантовой же механике положение совершенно меняется. Уже неоднократно указывалось, что, в силу принципа неопределенности, понятие о траектории электрона полностью теряет смысл. Если положение электрона точно известно в настоящий момент времени, то уже в следующий момент его координаты вообще не имеют никакого определенного значения. Поэтому, локализовав электроны и перенумеровав их в некоторый момент времени, мы этим ничего не добьемся для целей их идентификации в дальнейшие моменты времени; локализовав один из электронов в другой момент времени в некоторой точке пространства, мы не сможем указать, какой именно из электронов попал в эту точку.

Таким образом, в квантовой механике принципиально не существует никакой возможности следить в отдельности за каждой из одинаковых частиц и тем самым различать их. Можно сказать, что в квантовой механике одинаковые частицы полностью теряют свою «индивидуальность». Одинаковость частиц по их физическим свойствам имеет здесь весьма глубокий характер — она приводит к полной неразличимости частиц.

Этот, как говорят, принцип неразличимости одинаковых частиц играет основную роль в квантовой теории систем, состоящих из одинаковых частиц. Начнем с рассмотрения системы, состоящей всего из двух частиц. В силу их тождественности, состояния системы, получающиеся друг из друга просто перестановкой обеих частиц, должны быть физически полностью эквивалентными. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на несущественный фазовый множитель. Пусть $\psi(\xi_1, \xi_2)$ — волновая функция системы, причем ξ_1, ξ_2 условно обозначают совокупности трех координат и проекции спина каждой из частиц. Тогда должно быть

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = e^{i\alpha} \psi(\xi_2, \xi_1),$$

где α — некоторая вещественная постоянная. В результате повторной перестановки мы вернемся к исходному состоянию, между тем как функция ψ окажется умноженной на $e^{2i\alpha}$. Отсюда следует, что $e^{2i\alpha} = 1$ или $e^{i\alpha} = \pm 1$. Таким образом, $\psi(\xi_1, \xi_2) = \pm \psi(\xi_2, \xi_1)$.

Мы приходим к результату, что имеется всего две возможности — волновая функция либо симметрична (т. е. совершенно не меняется в результате перестановки частиц), либо антисимметрична (т. е. при перестановке меняет знак). Очевидно, что волновые функции всех состояний одной и той же системы должны иметь одинаковую симметрию; в противном случае волновая функция состояния, представляющего собой суперпозицию состояний различной симметрии, была бы ни симметрична, ни антисимметрична.

Этот результат непосредственно обобщается на системы, состоящие из произвольного числа одинаковых частиц. Действительно, в силу одинаковости частиц ясно, что если какая-либо их пара обладает свойством описываться, скажем, симметричными волновыми функциями, то и всякая другая пара таких же частиц будет обладать тем же свойством. Поэтому волновая функция одинаковых частиц должна либо совершенно не меняться при перестановке любой пары частиц (а потому и при всякой вообще взаимной перестановке частиц), либо менять знак при перестановке каждой пары. В первом случае говорят о *симметричной*, а во втором случае — об *антисимметричной* волновой функции.

Бозоны и фермионы: связь спина со статистикой

О частицах, описываемых антисимметричными волновыми функциями, говорят как о подчиняющихся статистике Ферми-Дирака или о фермионах, а о частицах, описываемых симметричными функциями – как подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна или о бозонах.

В релятивистской квантовой механике естественные физические требования автоматически приводят к тому, что частицы со спином $\frac{1}{2}$ подчиняются статистике Ферми. Из этого следует и общее утверждение: все частицы с полуцелым спином являются фермионами, а частицы с целым спином (в том числе со спином 0) – бозонами.

Вторичное квантование: спин и статистика

В релятивистской квантовой теории полная энергия сохраняется, масса и полное число частиц не сохраняются. Релятивистская теория частиц – это теория с бесконечным числом степеней свободы, подобная теории поля.

Математический аппарат для описания систем с переменным числом частиц – вторичное квантование, в котором независимыми переменными являются числа заполнения различных состояний частицы. Оператор квантованной волновой функции (Ψ -оператор) разлагается по полному набору состояний свободной частицы (плоским волнам) с **положительными и отрицательными** “частотами” . :

$$\hat{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}_{\mathbf{p}} u(\varepsilon, \mathbf{p}) \exp(-i(\varepsilon t - \mathbf{p}r)) + \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} u(-\varepsilon, -\mathbf{p}) \exp(i(\varepsilon t - \mathbf{p}r)) \right\}$$

$$\hat{\Psi}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} \left\{ \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} u^*(\varepsilon, \mathbf{p}) \exp(i(\varepsilon t - \mathbf{p}r)) + \hat{b}_{\mathbf{p}} u^*(-\varepsilon, -\mathbf{p}) \exp(-i(\varepsilon t - \mathbf{p}r)) \right\}$$

$\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}, \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger}$ операторы рождения частиц и античастиц,

$\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{b}_{\mathbf{p}}$ операторы уничтожения частиц и античастиц с импульсами p и энергиями ε

В аппарате вторичного квантования гамильтониан системы частиц \hat{H} получается из гамильтониана одной частицы $H^{(1)}$ как интеграл

$$\hat{H} = \int \hat{\Psi}^{\dagger} \hat{H}^{(1)} \hat{\Psi} dV$$

¹⁾ Индекс (1) у гамильтониана частицы введен здесь для отличия его от гамильтониана всей системы.

В нерелятивистской теории это приводило к тривиальному результату. При подстановке Ψ -операторов

$$\hat{\Psi} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}, \quad \hat{\Psi}^{\dagger} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{p}}^*, \quad (86,2)$$

вне зависимости от правил коммутации операторов $\hat{a}_{\mathbf{p}}, \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger}$, получалось

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad (86,3)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ — собственные значения гамильтониана $H^{(1)}$, т. е. энергии свободной частицы. Собственные же значения операторных произведений $\hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}}$ есть числа заполнения состояний $N_{\mathbf{p}}$; поэтому собственные значения полной энергии системы оказывались равными очевидному выражению

$$E = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} N_{\mathbf{p}}.$$

Аналогичным образом получался тривиальный результат и для полного числа частиц в системе, оператор которого дается интегралом

$$\hat{N} = \int \hat{\Psi}^{\dagger} \hat{\Psi} dV. \quad (86,4)$$

При подстановке сюда Ψ -операторов (86,2) получалось

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}}, \quad (86,5)$$

так что собственные значения $N = \sum N_{\mathbf{p}}$.

В релятивистской же теории существование у гамильтониана частицы $H^{(1)}$ отрицательных собственных значений меняет ситуацию радикальным образом. Вместо (86,3) получается теперь

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger}. \quad (86,6)$$

Бозоны и фермионы: спин и статистика

В релятивистской же теории существование у гамильтониана частицы $\hat{H}^{(1)}$ отрицательных собственных значений меняет ситуацию радикальным образом. Вместо (86,3) получается теперь

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}^+. \quad (86,6)$$

Первая сумма отвечает положительным собственным значениям $\varepsilon_{\mathbf{p}} = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$; она имеет такой же вид, как и сумма (86,3). Вторая же сумма отвечает отрицательным собственным значениям, равным $-\varepsilon_{\mathbf{p}}$; отсюда — знак минус

перед этой суммой. Обратный же (по сравнению с первой суммой) порядок множителей $\hat{b}_{\mathbf{p}}$ и $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ во второй сумме связан с тем, что в Ψ -операторах (85,3) вместе с $\hat{a}_{\mathbf{p}}$ и $\hat{a}_{\mathbf{p}}^+$ фигурируют соответственно $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+$ и $\hat{b}_{\mathbf{p}}$. Аналогичным образом для оператора (86,4) (который обозначим теперь через \hat{Q}) получим вместо (86,5)

$$\hat{Q} = \sum_{\mathbf{p}} \hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}^+. \quad (86,7)$$

Для определения собственных значений операторов (86,6) и (86,7) необходимо предварительно привести порядок множителей во вторых суммах к стандартному: $\hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}}$; собственные значения именно таких произведений равны числам заполнения. Здесь, однако, становятся существенными правила коммутации, которым удовлетворяют операторы рождения и уничтожения частиц.

Легко видеть, что разумный результат для собственных значений гамильтониана (86,6) получится, лишь если эти операторы удовлетворяют правилам коммутации Ферми:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^+ + a_{\mathbf{p}}^+ a_{\mathbf{p}} &= 1, \\ b_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}}^+ + b_{\mathbf{p}}^+ b_{\mathbf{p}} &= 1. \end{aligned} \quad (86,8)$$

Действительно, в таком случае гамильтониан (86,6) принимает вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \varepsilon_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} + \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}} - 1).$$

Установив, таким образом, правила коммутации операторов уничтожения и рождения частиц, обратимся теперь к оператору (86,7). Изменив с помощью (86,8) порядок множителей во второй сумме, получим

$$\hat{Q} = \sum_{\mathbf{p}} (\hat{a}_{\mathbf{p}}^+ \hat{a}_{\mathbf{p}} - \hat{b}_{\mathbf{p}}^+ \hat{b}_{\mathbf{p}} + 1).$$

Формулы 17

Собственные значения этого оператора (снова за вычетом несущественной аддитивной постоянной $\sum 1$)

$$Q = \sum_{\mathbf{p}} (N_{\mathbf{p}} - \bar{N}_{\mathbf{p}}), \quad (86,10)$$

т. е. равны разностям полных чисел частиц и античастиц.

Этот результат очень важен. Оператор \hat{Q} отвечает той величине (84,2), закон сохранения которой выражается уравнением непрерывности (84,1). Мы видим теперь, что этот закон не требует сохранения числа частиц и числа античастиц по отдельности или же их суммы. Должна сохраняться лишь разность этих чисел. Другими словами, в процессах различных взаимодействий могут возникать и исчезать пары «частица — античастица»¹⁾. Разумеется, все такие процессы должны происходить с соблюдением законов сохранения энергии и импульса всей системы взаимодействующих частиц. В частности, исчезновение пары при столкновении частицы с античастицей должно сопровождаться появлением каких-то других частиц, обеспечивающих сохранение энергии и импульса; таковыми могут быть фотоны, — в таком случае говорят об *аннигиляции* пары.

Если частица электрически заряжена, то ее античастица должна иметь заряд противоположного знака: если бы та и другая имели одинаковые заряды, то возникновение или уничтожение их пары противоречило бы строгому закону природы — сохранению полного электрического заряда.

Величину Q иногда называют *зарядом поля* данных частиц. Для электрически заряженных частиц Q определяет полный заряд системы (измеренный в единицах элементарного заряда e). Подчеркнем, однако, что частицы и античастицы могут быть и электрически нейтральными¹⁾.

Формулы 17

Свойство описываться либо симметричными, либо антисимметричными волновыми функциями зависит от рода частиц. О частицах, описываемых антисимметричными функциями, говорят, как о подчиняющихся статистике Ферми — Дирака или о фермионах, а о частицах, описываемых симметричными функциями, — как подчиняющихся статистике Бозе — Эйнштейна или о бозонах¹⁾.

Мы увидим в дальнейшем (§ 87), что из законов релятивистской квантовой механики следует однозначная связь между статистикой, которой подчиняются частицы, и их спином: частицы с полуцелым спином являются фермионами, а частицы с целым спином — бозонами.

Статистика сложных частиц определяется четностью числа входящих в их состав элементарных фермионов. Действительно, перестановка двух одинаковых сложных частиц эквивалентна одновременной перестановке нескольких пар одинаковых элементарных частиц. Перестановка бозонов не изменяет волновой функции вообще, а перестановка фермионов меняет ее знак. Поэтому сложные частицы, содержащие нечетное число элементарных фермионов, подчиняются статистике Ферми, а содержащие четное число их, — статистике Бозе. Этот результат находится, конечно, в согласии с указанным выше общим правилом: сложная частица имеет целый или полуцелый спин в зависимости от того, четно или нечетно число входящих в ее состав частиц с полуцелым спином.

Так, атомные ядра с нечетным атомным весом (т. е. состоящие из нечетного числа протонов и нейтронов) подчиняются статистике Ферми, а с четным весом — статистике Бозе. Для атомов же, содержащих наряду с ядрами также и электроны, статистика определяется, очевидно, четностью или нечетностью суммы атомного веса и атомного номера.

Рассмотрим систему, состоящую из N одинаковых частиц, взаимодействием которых друг с другом можно пренебречь. Пусть ψ_1, ψ_2, \dots — волновые функции различных

¹⁾ Эта терминология связана с названием статистик, которыми описывается идеальный газ, состоящий из частиц, соответственно, с антисимметричными или симметричными волновыми функциями. В действительности мы имеем здесь дело не только с различными статистиками, но и по существу с различными механиками. Статистика Ферми была предложена Энрико Ферми для электронов в 1926 г., а ее связь с квантовой механикой была выяснена Дираком (1926). Статистика Бозе была предложена Д. Бозе для световых квантов и обобщена Эйнштейном (1924).

стационарных состояний, в которых может находиться каждая из частиц в отдельности. Состояние системы в целом можно определять перечислением номеров состояний, в которых находятся отдельные частицы. Возникает вопрос о том, каким образом должна быть составлена из функций ψ_1, ψ_2, \dots волновая функция ψ всей системы в целом.

Пусть p_1, p_2, \dots, p_N — номера состояний, в которых находятся отдельные частицы (среди этих номеров могут быть и одинаковые). Для системы бозонов волновая функция $\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$ выражается суммой произведений вида

$$\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N), \quad (45,1)$$

со всеми возможными перестановками различных индексов p_1, p_2, \dots ; такая сумма обладает, очевидно, требуемым свойством симметрии. Так, для системы из двух частиц, находящихся в различных ($p_1 \neq p_2$) состояниях,

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)]. \quad (45,2)$$

Множитель $1/\sqrt{2}$ введен для нормировки (все функции ψ_1, ψ_2, \dots взаимно ортогональны и предполагаются нормированными). В общем же случае системы произвольного числа N частиц нормированная волновая функция

$$\psi = \left(\frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) \dots \psi_{p_N}(\xi_N), \quad (45,3)$$

где сумма берется по всем перестановкам различных индексов p_1, p_2, \dots, p_N , а числа N_i указывают, сколько из всех этих индексов имеют одинаковые значения i (при этом $\sum N_i = N$). При интегрировании квадрата $|\psi|^2$ по $d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_N$ обращаются в нуль все члены, за исключением только квадратов модулей каждого из членов суммы¹⁾; поскольку общее число членов в сумме (45,3) равно, очевидно,

$$\frac{N!}{N_1! N_2! \dots},$$

то отсюда и получается нормировочный коэффициент в (45,3).

¹⁾ Под интегрированием по $d\xi$ условно подразумевается (здесь и в §§ 46, 47) интегрирование по координатам вместе с суммированием по σ .

Принцип Паули

Для системы фермионов волновая функция ψ есть антисимметричная комбинация произведений (45,1). Так, для системы из двух частиц имеем

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\xi_1) \psi_{p_2}(\xi_2) - \psi_{p_1}(\xi_2) \psi_{p_2}(\xi_1)]. \quad (45,4)$$

В общем же случае N частиц волновая функция системы записывается в виде определителя

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (45,5)$$

Перестановке двух частиц соответствует здесь перестановка двух столбцов определителя, в результате чего последний меняет знак.

Из выражения (45,5) следует важный результат. Если среди номеров p_1, p_2, \dots есть два одинаковых, то две строки определителя окажутся одинаковыми и весь определитель обратится тождественно в нуль. Он будет отличным от нуля только в тех случаях, когда все номера p_1, p_2, \dots различны. Таким образом, в системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии две (или более) частицы. Это — так называемый *принцип Паули*; он был установлен Вольфгангом Паули в 1925 г.

Система двух электронов

Полная антисимметричная (по отношению к перестановке электронов) волновая функция системы двух электронов может быть представлена в виде произведения спиновой и координатной частей.

Состоянию со спином $S=1$ отвечает симметричная (по отношению к перестановке электронов) спиновая волновая функция, следовательно координатная часть является антисимметричной.

Состоянию со спином $S=0$ отвечает антисимметричная (по отношению к перестановке электронов) спиновая волновая функция, следовательно координатная часть является симметричной.

В состоянии со спином $S=1$ и антисимметричной координатной волновой функцией электроны располагаются в среднем дальше друг от друга, чем в состоянии со спином $S=0$ и симметричной координатной волновой функцией. Поэтому при $S=1$ энергия отталкивания электронов меньше, чем при $S=0$.

Значение энергии системы зависит от ее полного спина. На этом основании можно говорить о некотором своеобразном взаимодействии частиц, приводящем к этой зависимости. Это взаимодействие называют обменным. Оно представляет собой чисто квантовый эффект, полностью исчезающий (как и сам спин) при предельном переходе к классической механике.

Первое правило Хунда: Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным значением S .

Возбужденные состояния простой двухэлектронной системы со спинами $S=1$ и $S=0$ в осцилляторной потенциальной яме (в состояниях с $n=0$ и $n=1$)

$$\text{norm}(n) := \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}$$

$$f_0(x) := \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right) \cdot \text{Her}(0, x) \cdot \text{norm}(0)$$

$$f_a(x, y) := f_0(x) \cdot f_1(y) - f_0(y) \cdot f_1(x)$$

$$f_s(x, y) := (f_0(x) \cdot f_1(y) + f_0(y) \cdot f_1(x))$$

$$f_1(x) := \exp\left(\frac{-x^2}{2}\right) \cdot \text{Her}(1, x) \cdot \text{norm}(1)$$

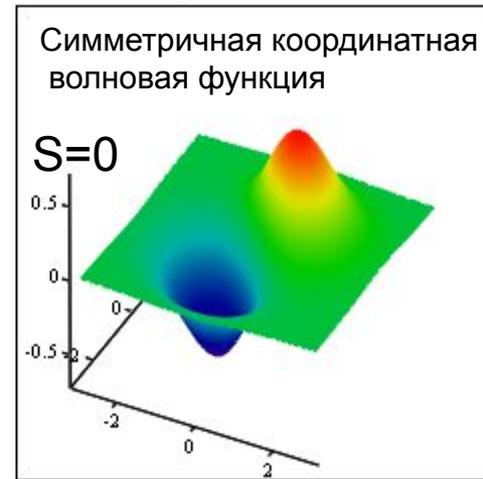
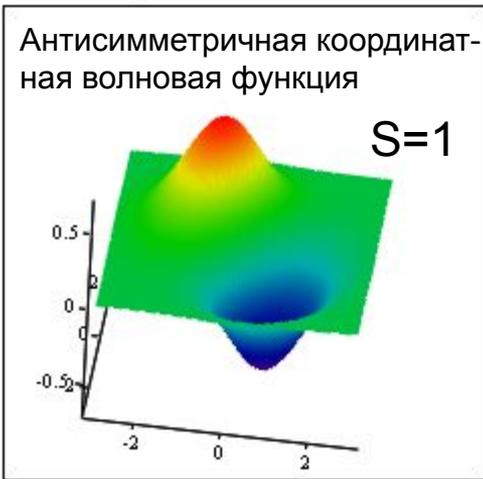
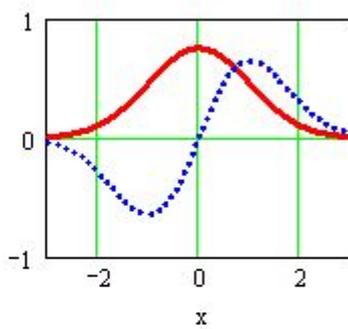
$$f_{an}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot f_a(x, y)$$

$$f_{sn}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot f_s(x, y)$$

$$f_s(x, y) := (f_0(x) \cdot f_1(y) + f_0(y) \cdot f_1(x))$$

$$f_a(x, y) := f_0(x) \cdot f_1(y) - f_0(y) \cdot f_1(x)$$

$f_0(x)$
—
 $f_1(x)$
.....



$$A := \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (|f_s(x, y)|)^2 dx dy$$

$$A = 2 \quad f_{sn}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot f_s(x, y)$$

$$A := \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (|f_{sn}(x, y)|)^2 dx dy \quad A = 1$$

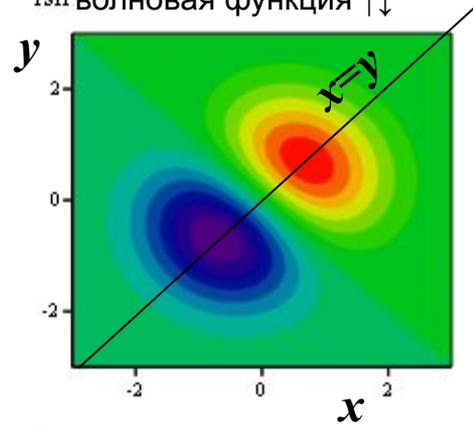
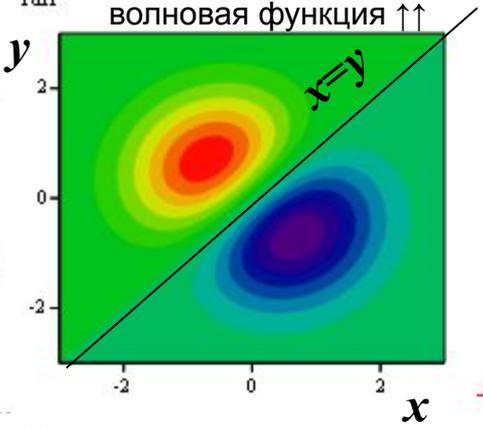
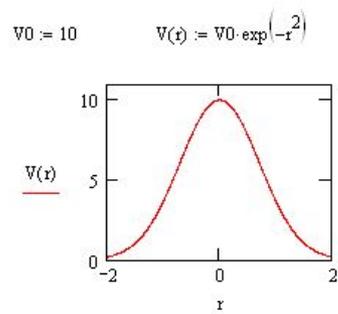
“отталкивание”
электронов

симметричная спиновая
волновая функция $\uparrow\uparrow$

антисимметричная спиновая
волновая функция $\uparrow\downarrow$

$$A := \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (|f_a(x, y)|)^2 dx dy$$

$$f_{an}(x, y) := \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot f_a(x, y)$$



$$A := \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (|f_{an}(x, y)|)^2 dx dy$$

Первое правило Хунда:
Наименьшей энергией
обладает терм с
наибольшим возможным
значением S

$A = 1$

$$V_a := \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} V(x-y) \cdot p_a(x, y) dx dy$$

$V_a = 1.925$

$$V_s := \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} V(x-y) \cdot p_s(x, y) dx dy$$

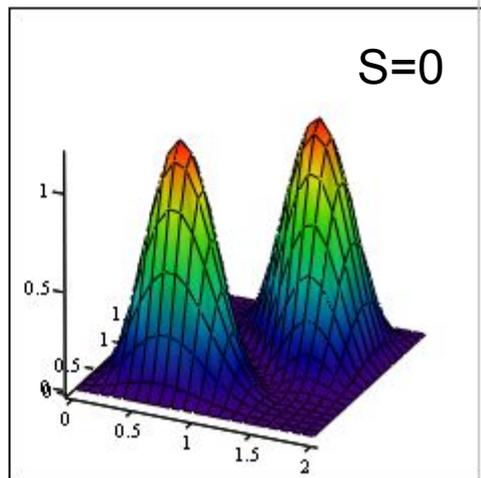
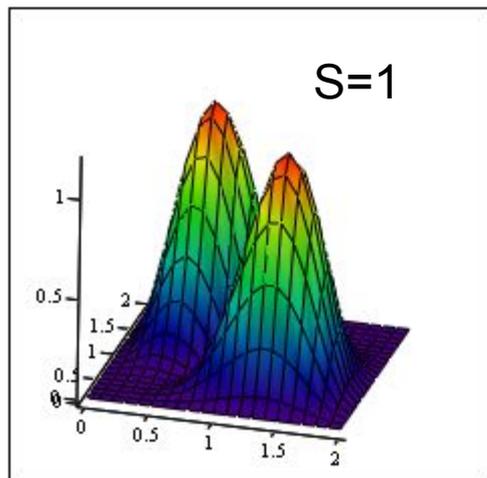
$V_s = 2.887$

f_{an} энергия отталкивания меньше у состояния с $S=1$, в котором электроны находятся в среднем дальше друг от друга, чем при $S=0$

Плотности вероятности для антисимметричной и симметричной координатной волновой функции двух электронов в прямоугольной потенциальной яме

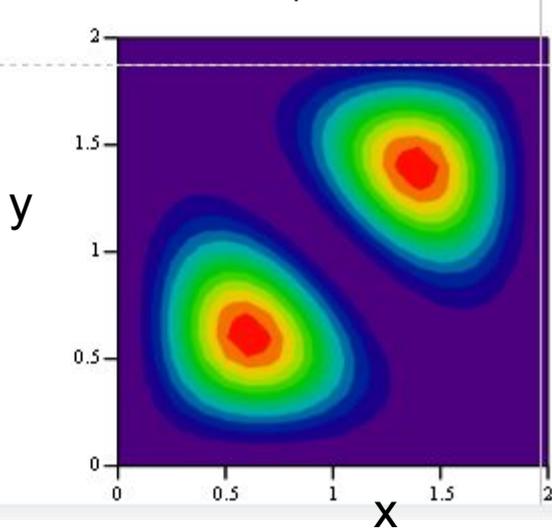
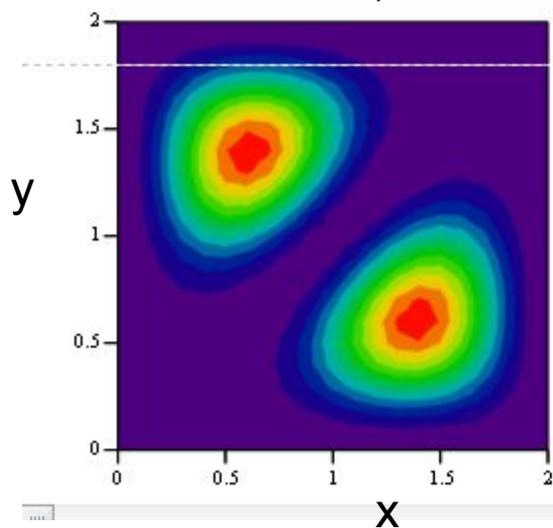
$$p_a(x,y) := (|f_{an}(x,y)|)^2$$

$$p_s(x,y) := (|f_{sn}(x,y)|)^2$$



p_a Антисимметричная

p_s Симметричная



Плотности вероятности для антисимметричной и симметричной координатной волновой функции двух электронов в прямоугольной потенциальной яме (в состояниях с $n=1$ и $n=2$)

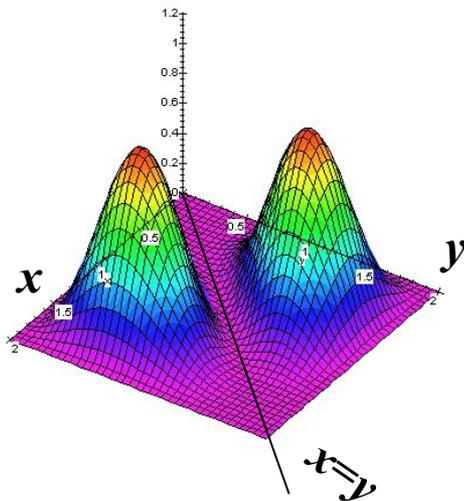
Антисимметричная координатная волновая функция

$$\Psi_A(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a} - \sin \frac{\pi y}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \right), \Psi_S(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{2\pi y}{a} + \sin \frac{\pi y}{a} \sin \frac{2\pi x}{a} \right)$$

Симметричная координатная волновая функция

```
> fa:=(x,y)->simplify((sin(Pi*x/a)*sin(2*Pi*y/a)-sin(Pi*y/a)*sin(2*Pi*x/a))^2/2.)
;
> plot3d(fa(x,y),x=0..a,y=0..a,grid=[40,40]);
fa=(x,y) -> simplify(.5000000000 (sin(pi*x/a) sin(2*pi*y/a) - sin(pi*y/a) sin(2*pi*x/a))^2)
```

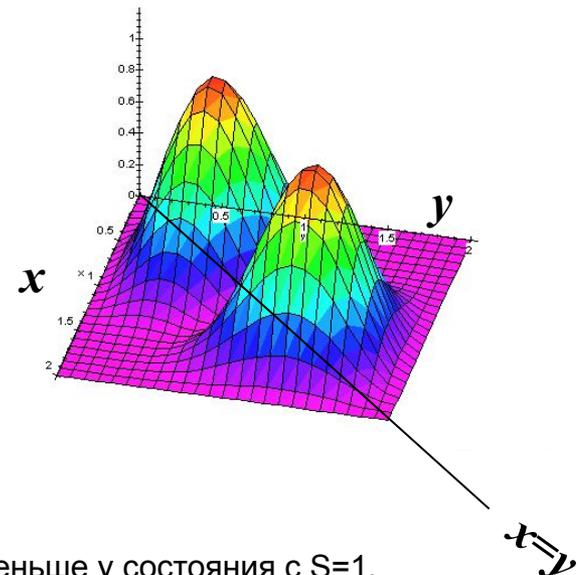
S=1



```

a:=2
b:=pi
> fs:=(x,y)->simplify((sin(Pi*x/a)*sin(2*Pi*y/a)+sin(Pi*y/a)*sin(2*Pi*x/a))^2/2.);
fs=(x,y) -> simplify(1/2 (sin(pi*x/a) sin(2*pi*y/a) + sin(pi*y/a) sin(2*pi*x/a))^2)
> plot3d(fs(x,y),x=0..a,y=0..a);
```

S=0



Первое правило Хунда:
Наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным значением S

энергия отталкивания меньше у состояния с S=1, в котором электроны находятся в среднем дальше друг от друга, чем при S=0

Основное и возбужденные состояния атома гелия

Электронные конфигурации (в приближении независимого движения электронов):

основное состояние $1s^2$: $S=0$, терм 1S , мультиплетность $2S+1=1$,

возбужденные состояния $1s2s$:

$S=1$, терм 3S , мультиплетность $2S+1=3$ (ортогелий),

$S=0$, терм 1S , мультиплетность $2S+1=1$ (парагелий).

Энергия ортогелия меньше энергии парагелия (вследствие обменного взаимодействия).

Орто- (от др.-греч. *ορθός* «прямой») и пара- (παρα- «против», «возле», «мимо»)

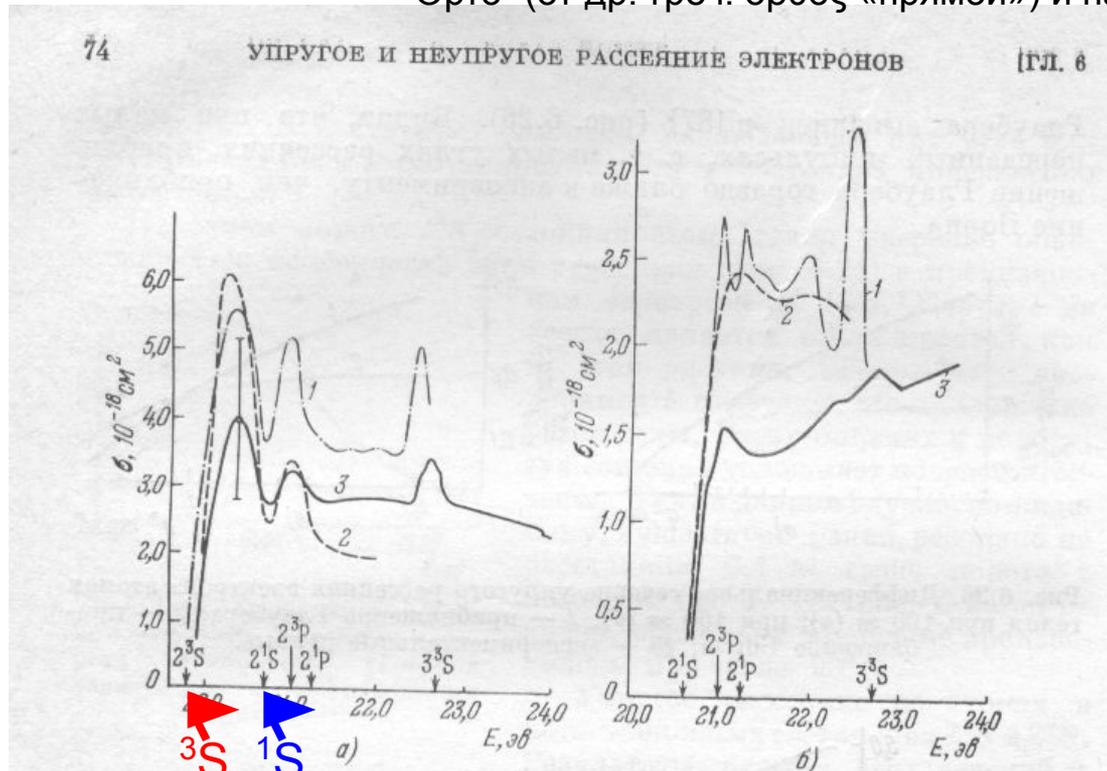


Рис. 6.28. Сечение возбуждения 2^3S -уровня атома гелия (а); 2^1S -уровня (б): 1 — расчеты матричным вариационным методом; 2 — методом сильной связи; 3 — экспериментальные данные.

Литература

1. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. В 5 Т. Т 5: Атомная и ядерная физика: учеб. пособие– М.: Физматлит, 2002
2. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 2. Квантовая механика. – М.: Наука. 1971.
3. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Наука. 1971.