Уравнение Шредингера в КТПД

Д. В. Гламазда
Уральский федеральный университет, Екатеринбург

13 мая 2018 г.

Оглавление

Аннотация

Приводится одна из глав второго тома книги автора «Квантовая теория полей движения», посвященная применению нерелятивистского уравнения Шредингера в КТПД.

4.1 Введение

До сих пор ни в первом томе [1], ни во втором мы ни разу не обращались к уравнению Шредингера. А между тем не будет преувеличением сказать, что с ним связана не только бо́льшая часть наших знаний об атомных системах, но и бо́льшая часть изложения квантовой механики в учебниках. Первое обусловлено тем, что атомы являются объектами, в которых многое можно понять, не прибегая к релятивистскому описанию. Вторым мы обязаны относительной простоте уравнения Шредингера. Поскольку квантовая теория не относится к легким дисциплинам, то изучать ее предпочитают на основе чего-нибудь попроще.

В квантовой теории полей движения рассказ об уравнении Шредингера неизбежен хотя бы потому, что нельзя обойти молчанием то, что является центральной частью теории, на смену которой приходит КТПД. Во-вторых, в КТПД представляется возможным формулировать это уравнение по-новому. В-третьих, многие вопросы квантовой теории все еще допускают более простое решение, без использования релятивистских уравнений. И здесь естественным образом мы снова обращаемся к уравнению Шредингера.

4.2 Нерелятивистское уравнение динамики

Прямым следствием универсального уравнения динамики в КТПД

$$\hat{P}^{\circledast}_{\mu}\hat{P}^{\,\mu}\mathbf{\Psi} = 0$$

является уравнение Клейна – Гордона – Фока (КГФ)

$$\partial_\mu \partial^{\,\mu}\Psi + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0. \qquad (4.1)$$

Оно появляется после того как в $\mathbf{\Psi} = \Psi\phi\ldots$ учтено наличие радиальных полей движения с мнимой плотностью импульса, ответственных за формирование массовых членов. В дальнейшем для описания движения любого типа, имеющего место в микромире, как свободного, так и финитного, может быть использовано уравнение в форме (4.1). В отличие от традиционной квантовой теории, где ему сопоставляются только бесспиновые поля, в КТПД оно обладает *полной универсальностью* благодаря иным принципам построения формализма теории полей движения. С помощью скалярных комплексных функций оно может описывать динамику полей движения с любым значением собственного углового момента.

Уравнение КГФ является релятивистским и по этой причине обладает избыточной точностью, если речь идет о решении задач, в которых релятивистскими эффектами можно пренебречь. Если бы только этим дело и ограничивалось, то само по себе это не могло бы считаться неудобством. Однако превосходство в точности, увы, чаще всего имеет недостаток – излишнюю громоздкость. Это побуждает искать для названного круга задач упрощенный вариант уравнения динамики. Таким *нерелятивистским* уравнением в квантовой механике является уравнение Шредингера. Эта же роль предоставляется ему и в квантовой теории полей движения. Только в КТПД удобнее пользоваться его формой, несколько отличной от той, которую оно обычно имеет в квантовой механике. Впрочем, это имеет отношение именно к форме, а не к содержанию.

Чтобы вывести уравнение Шредингера для КТПД, используем стандартные принципы построения квантовой теории. При этом начнем с вывода уравнения КГФ. Это необходимо, чтобы понять логику и физический смысл выкладок. Как известно, классическим прототипом уравнения КГФ является так называемое уравнение массовой поверхности

$$\frac{E^2}{c^2} - \boldsymbol{p}^2 = m^2 c^2 \tag{4.2}$$

из теории относительности. Оно дает универсальную связь между энергией E, импульсом $\boldsymbol{p}$ и массой m для любого материального объекта. Если рассматривать его как уравнение динамики, в котором перемешаны как явные, так и скрытые движения, то переход от него к квантовомеханическому варианту выполняется просто формальным применением принципа соответствия Бора. Заменим физические величины операторами

$$E \quad \longrightarrow \quad \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \qquad\qquad \boldsymbol{p} \quad \longrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar \nabla$$

и подставим волновую функцию, на которую они должны действовать. Структуру классического выражения при этом сохраняем:

$$\frac{1}{c^2} \hat{E} \left(\hat{E} \Psi \right) - \hat{\boldsymbol{p}} \left(\hat{\boldsymbol{p}} \Psi \right) = m^2 c^2 \Psi \qquad \Longrightarrow \qquad \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Delta \Psi + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi = 0. \tag{4.3}$$

Аналогом этого уравнения, записанным в ковариантной 4-мерной форме, является выражение (4.1).

Очевидно, что если в качестве исходного классического выражения взять упрощенный, нерелятивистский вариант соотношения для массовой поверхности (4.2) и применить к нему принцип соответствия, то должно получиться квантовомеханическое уравнение, являющееся *нерелятивистским* приближением уравнения Клейна – Гордона – Фока. Перепишем уравнение массовой поверхности в виде

$$E = c\sqrt{m^2 c^2 + \boldsymbol{p}^2} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2 c^2}}.$$

В нерелятивистском случае $\boldsymbol{p} \ll mc$, поэтому квадратный корень можно заменить его разложением в ряд

$$E = mc^2 \left(1 + \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2} - \frac{1}{8}\frac{\boldsymbol{p}^4}{m^4c^4} + \ldots\right).$$

Ограничившись членом не выше второй степени по малой величине $\boldsymbol{p}/mc$, получаем

$$E - mc^2 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}. \tag{4.4}$$

Это выражение для кинетической энергии, т.е. энергии наблюдаемого движения, связанного с импульсом $\boldsymbol{p}$. Введем обозначение

$$T = E - mc^2,$$

после чего останется

$$T = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}.$$

Теперь применим принцип соответствия Бора. Сопоставляя физическим величинам квантовомеханические операторы и подставляя волновую функцию, находим

$$\hat{T}\Psi = \frac{1}{2m}\,\hat{\boldsymbol{p}}\,(\hat{\boldsymbol{p}}\Psi),$$

откуда

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi. \tag{4.5}$$

Это и есть наше искомое нерелятивистское уравнение. И хотя оно отличается от «канонической» записи уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \qquad \Longleftrightarrow \qquad i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \hat{U}\Psi,$$

мы тем не менее будем так его называть. Внимательный читатель без труда увидит, что «каноническое» уравнение Шредингера для свободной частицы (когда потенциальная энергия U равна 0) совпадает с (4.5). Но это вовсе не означает, что полученным нами уравнением нельзя пользоваться в случае систем, в которых имеет место взаимодействие! Формализм КТПД построен по-другому, вследствие чего область применения уравнения (4.5) ничуть не меньше таковой для «канонической» формы уравнения Шредингера. Конечно, если, по условию, Ψ дана в «последней инстанции», т.е. лишена какого-либо *парциального состава*, то тогда уравнение (4.5) действительно есть уравнение свободно движущегося объекта, решением которого является плоская волна

$$\Psi(t, \boldsymbol{r}) = c_0\, e^{-i(\omega t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}$$

с частотой ω и волновым вектором $\boldsymbol{k}$, связанными соотношением

$$\omega = \frac{\hbar \boldsymbol{k}^2}{2m}.$$

Действительно, умножив это выражение на $\hbar$, получаем

$$T = \hbar\omega = \frac{(\hbar \boldsymbol{k})^2}{2m} \equiv \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m},$$

что снова убеждает нас в том, что вся энергия плоской волны является кинетической по своей природе. Это типичная дебройлевская волна, описывающая переносное движение, т.е. движение, при котором центр масс объекта перемещается относительно выбранной системы отсчета.

Однако если у общего поля движения Ψ мы подразумеваем парциальный состав, в котором содержится хотя бы одно *поле реакции* (на воздействие), например

$$\Psi = \psi f,$$

то мы уже фактически сформулировали задачу, имеющую дело с взаимодействием. Подставляем определенную таким образом ВФ в наше уравнение Шредингера (4.5)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi f) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta(\psi f). \tag{4.6}$$

Выполняем дифференцирования произведений:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}f + i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[(\Delta\psi)f + (\Delta f)\psi + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla f)\right]. \tag{4.7}$$

Для дальнейшего необходимо знать, как действуют производные по времени и координатам на поле реакции f. В случае электромагнитного взаимодействия необходимые выражения даются Постулатом VI (см. том 1, раздел 2.14). А именно, если рассматриваемый объект – поле движения ψ – имеет электрический заряд Q, а поле реакции создается электромагнитным 4-потенциалом $A^\mu = (\Phi,\, \boldsymbol{A})$, то

$$\partial^\mu f = \frac{iQ}{\hbar c}A^\mu f. \tag{4.8}$$

От ковариантного вида соотношений можно перейти к обычным 3-мерным:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{iQ}{\hbar}\Phi f, \qquad \nabla f = -\frac{iQ}{\hbar c}\boldsymbol{A} f, \tag{4.9}$$

а повторное применение градиента позволяет получить еще и следующее:

$$\Delta f = -\frac{Q^2\boldsymbol{A}^2}{\hbar^2 c^2}f. \tag{4.10}$$

При работе с уравнением Шредингера в рамках КТПД эти соотношения будут востребованы постоянно. Теперь мы знаем, что это связано с новым методом учета взаимодействия. Здесь нужно уметь не столько составлять гамильтониан $\hat{H}$, сколько указывать парциальный состав поля движения и знать связь с потенциалами. Впрочем, в КТПД мы также будем пользоваться «каноническим» способом составления уравнения Шредингера, если будем иметь дело не с конкретными электромагнитными взаимодействиями, а с некоторыми *абстрактными* взаимодействиями явно искусственного вида. Примерами таких задач можно считать задачи о движении в потенциальной яме, о гармоническом осцилляторе, и т.д. Они будут рассмотрены ниже.

Вернемся к нашему уравнению (4.7) и подставим в него необходимые производные поля реакции:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}f - Q\Phi\psi f = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta\psi - \frac{Q^2\boldsymbol{A}^2}{\hbar^2c^2}\psi - 2\frac{iQ}{\hbar c}\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\psi)\right]f.$$

Легко видеть, что на f можно сократить. В итоге получаем:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + \frac{iQ\hbar}{mc}\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\psi) + \left(Q\Phi + \frac{Q^2\boldsymbol{A}^2}{2mc^2}\right)\psi}_{\hat{H}\psi}. \tag{4.11}$$

Если возникает необходимость учета большего количества взаимодействий, то для каждого из них заводится свое поле реакции:

$$\Psi = \psi f_1 f_2 \dots$$

В этом случае дифференцирование даст намного больше слагаемых. Среди них необходимо будет учесть результаты действия производных на поля реакции. Поскольку каждому полю реакции f_k подбирается свой 4-потенциал $A^\mu_{(k)}$, то этот учет выполняется по формулам (4.8) – (4.10). После этого становится возможным сократить уравнение на поля реакции f_1, f_2, ... и получить окончательное уравнение для искомого поля движения ψ.

4.3 Уравнение для простейшего атома

В качестве примера найдем уравнение Шредингера для поля внутреннего движения в водородоподобном атоме. В томе 1 (раздел 4.4) было показано, что в общем случае задача сводится к релятивистскому уравнению движения приведенного электрона с массой $\bar{m}$:

$$\partial_\mu\partial^\mu\Psi + \frac{\bar{m}^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0.$$

С точностью до обозначения массы это снова уравнение КГФ, фигурировавшее в предыдущем разделе при выводе уравнения Шредингера. Поэтому весь вывод последнего повторяется с единственным отличием – масса m меняется на $\bar{m}$. Следовательно, в начальном виде наше уравнение Шредингера есть

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Delta\Psi.$$

Из источников взаимодействий учитывать будем только кулоновское поле ядра, так что 4-потенциал имеет вид

$$A^\mu = (\Phi,\, \boldsymbol{A}) = \left(\frac{Ze}{r},\, 0, 0, 0\right),$$

а поле движения содержит в своем составе единственное поле реакции:

$$\Psi = \psi f.$$

Спин электрона пока не учитываем. До этого места все обстоятельства задачи совпадают с теми, которые были в примере предыдущего раздела. Поэтому мы не будем выписывать еще раз те же выкладки, а сразу запишем уравнение, к которому они приводят[1]:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Delta\psi + \frac{iQ\hbar}{\bar{m}c}\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\psi) + \left(Q\Phi + \frac{Q^2\boldsymbol{A}^2}{2\bar{m}c^2}\right)\psi.$$

После подстановки заряда электрона $Q = -e$ и компонент Φ, $\boldsymbol{A}$ электромагнитного 4-потенциала получаем знакомое из квантовой механики нерелятивистское уравнение движения электрона в кулоновском поле:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Delta\psi - \frac{Ze^2}{r}\psi. \tag{4.12}$$

Основные этапы его решения следующие. Полагаем, что поле движения стационарно, представляем его в виде

$$\psi(t, \boldsymbol{r}) = e^{-iEt/\hbar}\phi(\boldsymbol{r})$$

и переходим к так называемому стационарному уравнению Шредингера:

$$\Delta\phi + \frac{2\bar{m}}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\phi = 0.$$

[1] Которое с точностью до замены $m \to \bar{m}$ повторяет (4.11).

Решаем его в сферических координатах:

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}\phi+\frac{2\bar{m}}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)\phi=0.$$

С помощью подстановки

$$\phi(\boldsymbol{r})=R(r)Y(\theta,\varphi)$$

производим разделение переменных и получаем два уравнения для новых независимых функций:

$$\begin{cases}\dfrac{d^2R}{dr^2}+\dfrac{2}{r}\dfrac{dR}{dr}+\left(\dfrac{2\bar{m}E}{\hbar^2}+\dfrac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2 r}-\dfrac{\gamma}{r^2}\right)R=0,\\ \Delta_{\theta,\varphi}Y+\gamma Y=0.\end{cases}$$

Второе уравнение имеет множество решений в виде сферических функций, т.е. выражается через присоединенные полиномы Лежандра и мнимые экспоненты:

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=\mathrm{const}(l,m)\cdot P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}.$$

Число l берет свое происхождение от постоянной γ разделения переменных:

$$\gamma=l(l+1).$$

Решение оставшегося уравнения для радиальной волновой функции

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[\frac{2\bar{m}E}{\hbar^2}+\frac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 \tag{4.13}$$

выпишем подробно, чтобы для дальнейшего иметь ясное представление о *возможностях* уравнения Шредингера по части вычисления энергии термов[2)].

Уравнение (4.13) описывает финитное движение, поэтому оно имеет решение, если энергия E отрицательна. Введем обозначение

$$\kappa^2=-\frac{2\bar{m}E}{\hbar^2}, \tag{4.14}$$

после чего уравнение примет вид

$$\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[-\kappa^2+\frac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0.$$

[2)] В томе 1 приводится подробное решение аналогичного уравнения для $R(r)$, полученного из уравнения Клейна – Гордона – Фока. Тем не менее решение уравнения (4.13) мы проводим здесь независимо и подробно, т.к. цель состоит именно в том, чтобы выяснить различия «мощности» этих двух подходов. Чтобы читатель точно знал, когда еще можно воспользоваться уравнением Шредингера, а когда уже следует переходить к уравнению КГФ.

Его решение ищем в виде

$$R(r) = r^b e^{-\kappa r} W(r),$$

где b – произвольная постоянная, $W(r)$ – новая функция от r. С этими новыми величинами

$$\frac{dR}{dr} = e^{-\kappa r} r^{b-1}(b - \kappa r)W + r^b e^{-\kappa r}\frac{dW}{dr},$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} = e^{-\kappa r}\left[r^b \frac{d^2W}{dr^2} + 2r^{b-1}(b-\kappa r)\frac{dW}{dr} + r^{b-2}(b^2 - b - 2b\kappa r + \kappa^2 r^2)W\right].$$

Подставляем функцию и ее производные в уравнение и после сокращения экспоненты $\exp(-\kappa r)$ и приведения подобных получаем:

$$r^b \frac{d^2W}{dr^2} + 2r^{b-1}(b - \kappa r + 1)\frac{dW}{dr} +$$
$$+\left[b^2 + b - l(l+1) + r\left(\frac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2} - 2b\kappa - 2\kappa\right)\right] r^{b-2}W = 0.$$

Произвольную константу b выбираем такой, чтобы выполнялось

$$b^2 + b - l(l+1) = 0.$$

Получаем $b = l$. Уравнение значительно упрощается. Появляется возможность дополнительно сократить на r^{l-1}, после чего остается

$$r\frac{d^2W}{dr^2} + 2(l - \kappa r + 1)\frac{dW}{dr} + 2\left(\frac{\bar{m}Ze^2}{\hbar^2} - \kappa l - \kappa\right)W = 0.$$

Произведем замену переменной:

$$r = \frac{\rho}{2\kappa} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \rho = 2\kappa r.$$

Тогда

$$\frac{dW}{dr} = 2\kappa\frac{dW}{d\rho}, \qquad \frac{d^2W}{dr^2} = 4\kappa^2\frac{d^2W}{d\rho^2},$$

и мы приходим к уравнению в новых переменных

$$\rho\frac{d^2W}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho)\frac{dW}{d\rho} + \left(\frac{\bar{m}Ze^2}{\kappa\hbar^2} - l - 1\right)W = 0. \tag{4.15}$$

Его решение представим в виде степенного ряда

$$W(\rho) = \sum_{k=0} a_k \rho^k. \tag{4.16}$$

Соответствующие производные будут

$$\frac{dW}{d\rho} = \sum_{k=0} a_k k \rho^{k-1}, \qquad \frac{d^2W}{d\rho^2} = \sum_{k=0} a_k k(k-1)\rho^{k-2}.$$

После подстановки в уравнение получаем:

$$\sum_{k=0} a_k k(k-1)\rho^{k-1} + 2(l+1)\sum_{k=0} a_k k \rho^{k-1} - \sum_{k=0} a_k k \rho^k + \left(\frac{\bar{m}Ze^2}{\varkappa\hbar^2} - l - 1\right)\sum_{k=0} a_k \rho^k = 0.$$

В первых двух суммах переопределим счетчик ряда. Полагаем

$$k - 1 = k' \qquad \longleftrightarrow \qquad k = k' + 1,$$

тогда

$$\sum_{k'=-1} a_{k'+1} k'(k'+1)\rho^{k'} + 2(l+1)\sum_{k'=-1} a_{k'+1}(k'+1)\rho^{k'} -$$
$$- \sum_{k=0} a_k k \rho^k + \left(\frac{\bar{m}Ze^2}{\varkappa\hbar^2} - l - 1\right)\sum_{k=0} a_k \rho^k = 0.$$

Поскольку при $k' = -1$ члены первых двух сумм равны 0, то начинать суммирование в них можно с $k' = 0$. А это позволяет в счетчике суммирования k' вернуться к прежнему обозначению k, после чего становится

$$\sum_{k=0} a_{k+1} k(k+1)\rho^k + 2(l+1)\sum_{k=0} a_{k+1}(k+1)\rho^k -$$
$$- \sum_{k=0} a_k k \rho^k + \left(\frac{\bar{m}Ze^2}{\varkappa\hbar^2} - l - 1\right)\sum_{k=0} a_k \rho^k = 0.$$

Поскольку во всех суммах ρ имеет одинаковую степень k, можем записать

$$\sum_{k=0} \left\{ a_{k+1}[k(k+1) + 2(l+1)(k+1)] - a_k\left(k + l + 1 - \frac{\bar{m}Ze^2}{\varkappa\hbar^2}\right)\right\}\rho^k = 0.$$

Благодаря независимости ρ^k при разных k это соотношение возможно только тогда, когда выражение в фигурных скобках тождественно равно 0. Отсюда получаем рекуррентную формулу для коэффициентов a_k:

$$a_{k+1} = \frac{k + l + 1 - \dfrac{\bar{m} Z e^2}{\varkappa \hbar^2}}{(k+1)(k+2l+2)}\, a_k.$$

Чтобы превратить бесконечный ряд (4.16) в полином конечной степени, потребуем, чтобы при некотором $k = n_r$ выполнялось условие

$$n_r + l + 1 - \frac{\bar{m} Z e^2}{\varkappa \hbar^2} = 0. \tag{4.17}$$

Тогда все коэффициенты a_k, начиная с $(n_r + 1)$-го будут равны 0, т.е. ряд действительно превратится в полином степени n_r.

Введем обозначение для главного квантового числа:

$$n = n_r + l + 1,$$

после чего из соотношения (4.17) получим следующее:

$$\varkappa n = \frac{\bar{m} Z e^2}{\hbar^2}.$$

Возведем обе стороны в квадрат

$$\varkappa^2 n^2 = \frac{\bar{m}^2 Z^2 e^4}{\hbar^4}$$

и вспомним определение $\varkappa^2$ из (4.14). Результатом будет известная формула для энергии водородоподобного атома в нерелятивистском приближении (для так называемых *бальмеровских уровней* [2]):

$$E = E_n = -\frac{1}{2} \cdot \frac{\bar{m} Z^2 e^4}{\hbar^2 n^2} = -\frac{\bar{m} c^2}{2} \cdot \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2}. \tag{4.18}$$

Энергия оказывается зависящей только от главного квантового числа n. Числа углового момента l, m в выражение не входят. Между тем волновая функция $\psi(t, \boldsymbol{r})$, являющаяся решением уравнения Шредингера, зависит от всех вовлеченных в данную задачу квантовых чисел:

$$\psi_{nlm} = \mathrm{const} \cdot e^{-iE_n t/\hbar} (2\varkappa r)^l e^{-\varkappa r} L^{2l+1}_{n-l-1}(2\varkappa r) P^m_l(\cos\theta) e^{im\varphi}. \tag{4.19}$$

Одной и той же энергии E_n может соответствовать несколько ВФ с отличающимися числами l, m. Такая ситуация известна под названием *вырождения* *состояний.* Мы говорим здесь именно «ситуация», а не «явление», поскольку реальным физическим явлением это может и не быть. Иногда это может быть просто следствием упрощенного теоретического описания, как в данном случае. Более точная формула, связанная с решением уравнения Клейна – Гордона – Фока, была получена в томе 1. Она показывает, что энергия должна зависеть немного и от углового квантового числа. Правда, в той задаче не учитывался спин, угловой момент был представлен только орбитальным моментом $\boldsymbol{L}$. Поэтому результат расходился с данными экспериментов, требующими чтобы для энергии роль играл полный момент $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$. Там же далее была получена формула тонкой структуры[3)], исправившая этот принципиальный недостаток:

$$E_{nj} = -\frac{\bar{m}c^2}{2}\left[\frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} + \frac{\alpha^4 Z^4}{n^3}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right)\right]. \tag{4.20}$$

Сравнение соотношений для энергии (4.18) и (4.20) наглядно демонстрирует, что от уравнения Шредингера нельзя требовать тех результатов, которые могут быть достигнуты с релятивистским уравнением. Но зато часто бывает так, что процесс решения с его помощью заметно проще!

4.4 Гармонический осциллятор и потенциальная яма

Излюбленными *абстрактными* объектами в квантовой механике являются гармонический осциллятор и потенциальная яма. Сейчас мы вспомнили о них, чтобы выяснить, как должна выглядеть их теория, если уравнение Шредингера формируется не «каноничеким» способом через гамильтониан, а принятым в КТПД, который использует поля реакции. В постулатах квантовой теории полей движения нет указаний на то, как должен выглядеть результат дифференцирования поля реакции в случае абстрактных воздействий, не являющихся электромагнитными. Однако из соображений единства физики следует, что большого отличия не должно быть.

Итак, пусть исходное уравнение Шредингера для нашего объекта – гармонического осциллятора – имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi.$$

Он движется под действием некоторой силы. Чтобы оставаться в рамках общего подхода, позволяющего использовать данную методику и в случае электромагнитного взаимодействия, сопоставим этой силе некоторый абстрактный 4-потенциал

$$A^{\mu} = \left(A^0,\, \boldsymbol{A}\right), \tag{4.21}$$

[3)] Также с помощью использования уравнения КГФ.

а выражение для 4-градиента от поля реакции возьмем в виде

$$\partial^\mu f = \frac{i}{\hbar c} A^\mu f. \tag{4.22}$$

Отсюда, в частности, следует:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} A^0 f, \qquad\qquad \nabla f = -\frac{i}{\hbar c} \boldsymbol{A} f. \tag{4.23}$$

Заметим, что по сравнению с выражением, даваемым для $\partial^\mu f$ Постулатом VI, в (4.22) – (4.23) отсутствует заряд Q. Оно и понятно, осциллятор является абстрактным, его конкретное материальное воплощение не уточняется. Но, с другой стороны, при строгом подходе к терминологии мы должны заметить, что при отсутствии заряда величина A^μ должна считаться уже не потенциалом, а *потенциальной энергией*. Впрочем, эта терминологическая тонкость постоянно нарушается в литературе, где U, входящую в гамильтониан, часто называют именно потенциалом, а не потенциальной энергией. Поэтому позволим себе эту вольность и мы.

Выберем для нашего гармонического осциллятора «потенциал»

$$A^\mu = \left(\frac{\kappa x^2}{2}, \, 0, 0, 0 \right)$$

и волновую функцию:

$$\Psi = \psi f.$$

Подставим ее в уравнение

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi f) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta(\psi f),$$

выполним требуемые действия:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} f + i\hbar \frac{\partial f}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[(\Delta\psi) f + (\Delta f)\psi + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla f) \right];$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} f - \frac{\kappa x^2}{2} \psi f = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta\psi) f + 0.$$

После сокращения на f остается хорошо знакомое уравнение гармонического осциллятора:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + \frac{\kappa x^2}{2} \psi \qquad \Longrightarrow \qquad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\kappa x^2}{2} \psi.$$

В переходе, обозначенном стрелкой, была учтена одномерность осциллятора.

Еще одной часто встречаемой задачей квантовой механики с абстрактным объектом является задача о потенциальной яме. Ее основной чертой можно считать задание потенциала с постоянной амплитудой U_0, различной для разных областей пространства. Обычно выбираются две-три области, центральная и по краям. В центре потенциал ниже, по краям выше, что и создает «яму». Легко видеть, что если мы выберем 4-потенциал в виде

$$A^\mu = (U_0,\, 0, 0, 0)\,,$$

то при сохранении всех прежних правил получим необходимое для данной задачи уравнение (в одномерном случае)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U_0\psi.$$

Мы ни в коей мере не настаиваем, чтобы задачи о гармоническом осцилляторе или о потенциальной яме теперь все начали формулировать описанным в этом разделе способом. Мы понимаем, что «канонический» способ привычнее. Нашей целью было лишь показать, что в общих принципах построения КТПД есть место и для уравнения Шредингера, причем независимо от конкретной задачи. В конце концов, главное не в том, каким способом формулируешь уравнение[4)], а в том, как его решаешь. Еще в оправдание подхода КТПД можно добавить, что в физике есть не только утилитарная сторона. И не факт, что важнее: технические приемы или объяснение глубинных причин. У поля реакции f есть наглядное физическое толкование: это дополнительное поле движения, вызванное воздействием. Поэтому нет ничего удивительного в том, что в формализме оно занимает то же место, что и любое другое поле движения. А вот квантовая механика «не видит» этого поля.

4.5 Уравнение Шредингера и спин

В квантовой механике учет собственного углового момента частиц – спина – задача очень непростая и математически неоднородная. Уравнение Паули представляет собой вариант уравнения Шредингера для двухкомпонентной ВФ и используется в качестве нерелятивистского приближения для спина $s = 1/2$. В релятивистском случае применяется уравнение Дирака для 4-компонентной волновой функции. Разительное отличие от этого «многоязычия» демонстрирует работа со спином в КТПД. Она основана все на том же принципе выбора парциального состава поля движения и ограничивается скалярными ВФ при любых отношениях v/c и при любой сложности рассматриваемой системы. В томе 1 было показано, как это выглядит в случае релятивистского подхода, а здесь мы покажем, как спин может быть учтен в уравнении Шредингера.

[4)] Если только оно оказывается сформулированным *правильно*!

Рассмотрим задачу о простейшем атоме из раздела 4.3, дополнив ее лишь необходимостью учета спина электрона. Поэтому исходным уравнением у нас будет

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi,$$

имеющее общее поле движения

$$\Psi = \psi\sigma f,$$

где добавилось новое поле σ – поле спина. Подставляем Ψ в уравнение, выполняем требуемые действия:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\sigma f + \underbrace{i\hbar\frac{\partial\sigma}{\partial t}\psi f}_{\to 0} + i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\psi\sigma = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[(\Delta\psi)\sigma f + (\Delta\sigma)\psi f + \underbrace{(\Delta f)\psi\sigma}_{\to 0} + \right.$$

$$\left. +2(\nabla\psi)\cdot(\nabla\sigma)f + \underbrace{2(\nabla\psi)\cdot(\nabla f)\sigma}_{\to 0} + \underbrace{2(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f)\psi}_{\to 0}\right].$$

Внизу указано, какие слагаемые должны быть отброшены. Второй член в левой части равен 0, потому что спиновое поле $\sigma = \sigma(\theta,\varphi)$ не зависит от времени. Далее перечислим отбрасываемые члены в правой части. Третий равен 0, поскольку компонента $\boldsymbol{A}$ 4-потенциала ядра, фигурирующая в производных по пространственным координатам, тождественно равна 0 (напомним, что потенциал ядра является чисто кулоновским). По этой же причине равны 0 пятый и шестой члены. Осталось уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\sigma f + i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\psi\sigma = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[(\Delta\psi)\sigma f + (\Delta\sigma)\psi f + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla\sigma)f\right]. \qquad (4.24)$$

Для учета действия дифференцирования на поле реакции f воспользуемся соотношениями (4.8) – (4.9), после чего получим:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\sigma f + \frac{Ze^2}{r}\psi\sigma f = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[(\Delta\psi)\sigma f + (\Delta\sigma)\psi f + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla\sigma)f\right].$$

Сократим на f:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\sigma = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[(\Delta\psi)\sigma + (\Delta\sigma)\psi + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla\sigma)\right] - \frac{Ze^2}{r}\psi\sigma. \qquad (4.25)$$

Представим поле движения ψ в виде

$$\psi = e^{-iEt/\hbar}R(r)Y(\theta,\varphi),$$

что автоматически означает, что мы используем сферическую систему координат в качестве пространственной СК. Уравнение (4.25) станет выглядеть как

$$E\,RY\sigma = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[\sigma\Delta(RY) + RY(\Delta\sigma) + 2\ (Y\nabla R + R\nabla Y)\cdot(\nabla\sigma)\right] - \frac{Ze^2}{r}RY\sigma.$$

В томе 1 было показано, что

$$\Delta\sigma = -\frac{s(s+1)}{r^2}\,\sigma, \tag{4.26}$$

где s – безразмерное (в единицах $\hbar$) квантовое число спина. Далее, в соотношении

$$(Y\nabla R + R\nabla Y)\cdot(\nabla\sigma) = \underbrace{Y(\nabla R)\cdot(\nabla\sigma)}_{\to 0} + R(\nabla Y)\cdot(\nabla\sigma)$$

остается только одно слагаемое: согласно *принципу наблюдаемости* (см. раздел 2.16 в томе 1), произведение градиентов радиального и вращательного полей движения равно 0. А из раздела 3.21 (том 1) следует, что

$$(\nabla Y)\cdot(\nabla\sigma) = -\frac{\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}\,Y\sigma, \tag{4.27}$$

где $\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{s}$ – векторы орбитального и спинового угловых моментов соответственно. В результате для уравнения имеем:

$$\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[\sigma\Delta(RY) - \frac{s(s+1)}{r^2}RY\sigma - 2\,\frac{\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}\,RY\sigma\right] + \left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)RY\sigma = 0.$$

Сокращаем на σ:

$$\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[\Delta(RY) - \frac{s(s+1)}{r^2}RY - 2\,\frac{\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}\,RY\right] + \left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)RY = 0.$$

Применяем выражение для оператора Лапласа Δ в сферических координатах:

$$Y\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2Y}{r}\frac{\partial R}{\partial r} + \frac{R}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}Y + \frac{2\bar{m}}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)RY - \frac{s(s+1) + 2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}\,RY = 0.$$

С помощью умножения на r^2/RY и разделения переменных получаем два независимых уравнения:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2R}{dr^2} + \dfrac{2}{r}\dfrac{dR}{dr} + \left[\dfrac{2\bar{m}E}{\hbar^2} + \dfrac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2 r} - \dfrac{s(s+1) + 2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} + \gamma}{r^2}\right]R = 0, \\ \Delta_{\theta,\varphi}Y + \gamma Y = 0. \end{cases}$$

Как обычно, второе уравнение дает $\gamma = |\boldsymbol{l}|^2 = l(l+1)$, с учетом чего

$$s(s+1) + 2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} + \gamma \equiv |\boldsymbol{s}|^2 + 2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s} + |\boldsymbol{l}|^2 = (\boldsymbol{s}+\boldsymbol{l})^2 = |\boldsymbol{j}|^2 = j(j+1),$$

где j – квантовое число полного момента импульса. Таким образом, мы пришли к уравнению

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2\bar{m}E}{\hbar^2} + \frac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2 r} - \frac{j(j+1)}{r^2}\right]R = 0, \tag{4.28}$$

с точностью до замены $l \leftrightarrow j$ повторяющему уравнение (4.13), которое было получено в аналогичной задаче в разделе 4.3, но без учета спина. Это говорит о том, что для энергии может быть получена лишь все та же *нерелятивистская* формула (4.18) с зависимостью от единственного квантового числа n. И хотя формула тонкой структуры остается недостижимой, тем не менее это уравнение Шредингера уже настраивает нас на то, что когда в задаче о водородоподобном атоме речь идет об энергии, среди угловых квантовых чисел на первое место выходит не l, а j.

4.6 Зееман-эффект

У читателя, возложившего слишком большие надежды на новый подход к уравнению Шредингера, результат предыдущего раздела может вызвать разочарование. Было заявлено, что теперь можно описывать спин, но формула для энергетических термов водородоподобного атома по-прежнему не содержит *никаких* квантовых чисел углового момента. «Техническую» причину этого установить нетрудно: не хватает так называемой *релятивистской поправки* – слагаемого $\alpha^2 Z^2/r^2$ в квадратных скобках в (4.28). А она, в свою очередь, отсутствует по той причине, что в уравнении Шредингера нет второй производной по времени. Для исправления ситуации существует искусственный способ получения релятивистской поправки [2], заключающийся в том, что максимальной степенью малой реличины $\boldsymbol{p}/mc$ в разложении энергии

$$E = mc^2\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{mc}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{\boldsymbol{p}}{mc}\right)^4 + \dots\right]$$

выбирают не 2, а 4. После перехода к квантовомеханическому уравнению слагаемое, содержащее оператор $\hat{\boldsymbol{p}}^4$, оказывается малым, что дает право воспользоваться методами теории возмущений и в итоге получить необходимую поправку.

Если не «зацикливаться» на одной только формуле тонкой структуры, то можно заметить, что во многих других задачах по учету спина, решаемых с помощью уравнения Шредингера, получаются вполне удовлетворительные результаты. Одним из таких примеров является теория эффекта Зеемана. Основные особенности этого явления описаны в томе 1. Там же была получена формула

$$E_{H} = \frac{e\hbar}{2\bar{m}c}(\boldsymbol{l} + 2\boldsymbol{s}) \cdot \boldsymbol{H} \tag{4.29}$$

для добавки к энергии, которую создает взаимодействие магнитного поля $\boldsymbol{H}$ с полями орбитального движения и спина электрона. Сейчас эту задачу мы рассмотрим повторно, но основным инструментом у нас будет «неканоническая» форма уравнения Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Delta\Psi. \tag{4.30}$$

Парциальный состав поля движения Ψ выбираем еще длиннее, чем в предыдущем разделе:

$$\Psi = \psi\sigma f_{N} f.$$

Здесь ψ – искомое поле относительного движения приведенного электрона, σ – поле спина электрона, f_{N} – поле реакции на ядро, f – поле реакции на внешнее магнитное поле. Полям реакции сопоставим 4-потенциалы

$$A^{\mu}_{N} = \left(\frac{Ze}{r}, 0, 0, 0\right), \qquad A^{\mu} = \left(0, -\frac{Hy}{2}, \frac{Hx}{2}, 0\right),$$

где $H \equiv |\boldsymbol{H}|$. Адекватность второго потенциала легко проверить с помощью непосредственной подстановки в формулу $\boldsymbol{H} = \mathrm{rot}\boldsymbol{A}$. Получится постоянное магнитное поле $\boldsymbol{H}$, направленное по оси Z.

Подставим Ψ в уравнение (4.30):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\sigma f_{N} f + \underbrace{i\hbar\frac{\partial\sigma}{\partial t}\psi f_{N} f}_{\to 0} + i\hbar\frac{\partial f_{N}}{\partial t}\psi\sigma f + \underbrace{i\hbar\frac{\partial f}{\partial t}\psi\sigma f_{N}}_{\to 0} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Bigg[(\Delta\psi)\sigma f_{N} f + (\Delta\sigma)\psi f_{N} f + \underbrace{(\Delta f_{N})\psi\sigma f}_{\to 0} + (\Delta f)\psi\sigma f_{N} +$$

$$+2(\nabla\psi)\cdot(\nabla\sigma) f_{N} f + \underbrace{2(\nabla\psi)\cdot(\nabla f_{N})\sigma f}_{\to 0} + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla f)\sigma f_{N} +$$

$$+ \underbrace{2(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f_{N})\psi f}_{\to 0} + 2(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f)\psi f_{N} + \underbrace{2(\nabla f_{N})\cdot(\nabla f)\psi\sigma}_{\to 0}\Bigg].$$

Поле спина σ не зависит от времени, поэтому второе слагаемое в левой части равно 0. Четвертый член в левой части равен 0, потому что временна́я компонента A^μ равна 0. В силу того, что все пространственные компоненты A_N^μ равны 0, в правой части равны нулю 3-й, 6-й, 8-й и 10-й члены. После учета действия дифференциальных операторов на поля реакции (где возможно) остается уравнение

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\sigma f_N f + \frac{Ze^2}{r}\psi\sigma f_N f = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[(\Delta\psi)\sigma f_N f - \frac{s(s+1)}{r^2}\psi\sigma f_N f - \right.$$
$$\left. -\frac{e^2\boldsymbol{A}^2}{\hbar^2c^2}\psi\sigma f_N f + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla\sigma)f_N f + 2(\nabla\psi)\cdot(\nabla f)\sigma f_N + 2(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f)\psi f\right]. \tag{4.31}$$

Попарные произведения градиентов приходится вычислять индивидуально. Сначала найдем те из них, что содержат ∇f:

$$(\nabla\psi)\cdot(\nabla f) = \frac{ie}{\hbar c}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}, \frac{\partial\psi}{\partial y}, \frac{\partial\psi}{\partial z}\right)\begin{pmatrix} -\dfrac{Hy}{2} \\ \dfrac{Hx}{2} \\ 0 \end{pmatrix} f = \frac{ieH}{2\hbar c}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial y} - y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) f =$$

$$= -\frac{eH}{2\hbar^2 c}(\hat{L}_z\psi)f = -\frac{eH}{2\hbar^2 c}\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right) f = -\frac{eHL_z}{2\hbar^2 c}\psi f, \tag{4.32}$$

где $\hat{L}_z$ – оператор проекции орбитального момента импульса на ось z, L_z – соответствующее собственное число, а φ – азимутальный угол сферической системы координат. Поскольку $\boldsymbol{H}$ направлена вдоль оси z, то, очевидно,

$$HL_z = \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{H} = \hbar(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{H}),$$

откуда следует

$$(\nabla\psi)\cdot(\nabla f) = -\frac{e}{2\hbar c}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{H})\psi f. \tag{4.33}$$

Займемся похожим слагаемым, содержащим взаимодействие полей σ и f. Строго говоря, для этого необходимо учитывать, что спиновое поле σ определено в собственной системе отсчета движущегося электрона. Можно воспользоваться альтернативной возможностью и считать электрон неподвижным, а магнитное поле движущимся. Тогда при преобразованиях Лоренца компоненты магнитного поля должны преобразовываться как элементы тензора 2-го ранга. Однако скорости в атоме не настолько большие, а необходимая нам точность не настолько высока, чтобы пускаться в неоправданно громоздкие выкладки. Мы пренебрежем релятивистскими эффектами. Если формально выполнить действия, похожие на (4.32), то получим

$$(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f) = -\frac{eH}{2\hbar^2 c}\left(-i\hbar\frac{\partial\sigma}{\partial\varphi}\right)f.$$

Однако здесь мы сталкиваемся еще с одним физическим явлением. Как известно, при наличии магнитного поля СЦИ атома $\boldsymbol{r}$ и СЦИ электрона $\boldsymbol{r}'$ испытывают так называемую *ларморову прецессию* с угловыми частотами

$$\omega_l = \frac{eH}{2m_e c}, \qquad \omega_s = \frac{eH}{m_e c}.$$

Поскольку оси z, z' систем параллельны, а время можем считать одинаковым, то для элементарных углов получаем:

$$d\varphi = \omega_l dt, \qquad d\varphi' = \omega_s dt.$$

Но тогда

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\varphi} = \frac{\partial\sigma}{\partial\varphi'}\cdot\frac{\partial\varphi'}{\partial\varphi} = is_z\sigma\frac{d\varphi'}{d\varphi} = is_z\sigma\frac{\omega_s}{\omega_l} = 2is_z\sigma,$$

откуда находим:

$$(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f) = -\frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{H})\sigma f. \tag{4.34}$$

Вернемся к уравнению (4.31) и представим ψ в виде

$$\psi(t,\boldsymbol{r}) = e^{-iEt/\hbar}R(r)Y(\theta,\varphi),$$

после чего получим:

$$E\,RY\sigma + \frac{Ze^2}{r}RY\sigma = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Bigg[\Delta(RY)\sigma - \frac{s(s+1)}{r^2}RY\sigma -$$

$$-\frac{e^2\boldsymbol{A}^2}{\hbar^2c^2}RY\sigma + 2(R\nabla Y + Y\nabla R)\cdot(\nabla\sigma) -$$

$$-\frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{H})RY\sigma - \frac{2e}{\hbar c}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{H})RY\sigma\Bigg].$$

Здесь мы попутно сократили на $f_N f$. Воспользуемся результатом предыдущего раздела:

$$(R\nabla Y + Y\nabla R)\cdot(\nabla\sigma) = -\frac{\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}RY\sigma,$$

и после сокращения на σ и перегруппировок находим:

$$\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\left[\Delta(RY) - \frac{s(s+1)}{r^2}RY - \frac{e^2\boldsymbol{A}^2}{\hbar^2c^2}RY - \frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{H}RY - 2\,\frac{\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}\,RY\right]+$$

$$+\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)RY = 0.$$

Третье, квадратичное по H слагаемое в квадратных скобках отбрасываем из-за его малости по сравнению с четвертым (линейным). Остается

$$Y\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2Y}{r}\frac{\partial R}{\partial r} + \frac{R}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}Y - \frac{s(s+1)+2\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s}}{r^2}RY - \frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{H}RY+$$

$$+\frac{2\bar{m}}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)RY = 0.$$

Умножаем на r^2/RY и разделяем переменные. Как обычно в этой задаче, переменная разделения оказывается равной $l(l{+}1)$, что позволяет ввести квантовое число полного момента импульса j. Уравнение для $Y(\theta,\varphi)$ при этом остается прежним (как в предыдущем разделе), а уравнение для радиального поля $R(r)$ станет выглядеть следующим образом:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[\frac{2\bar{m}E}{\hbar^2} + \frac{2\bar{m}Ze^2}{\hbar^2 r} - \frac{j(j+1)}{r^2} - \frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{H}\right]R = 0. \qquad (4.35)$$

Сравнивая с уравнением (4.28), видим, что энергия

$$E = E_n + \triangle E_H$$

помимо основной части типа бальмеровкого терма E_n должна содержать добавку

$$\triangle E_H = \frac{e\hbar}{2\bar{m}c}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{H} \approx \mu_B(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{H},$$

обусловленную взаимодействием полей вращения Y и σ с магнитным полем. Как известно, постоянная

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_ec} = 9.274\cdot 10^{-21}\ \text{эрг/Гс},$$

содержащая не приведенную, а истинную массу электрона m_e, называется *магнетоном Бора.* Таким образом, мы получили правильное «сырое» выражение (4.29) для влияния магнитного поля на энергию терма. Дальнейшее его поведение зависит от того, в каких отношениях находятся интенсивности попарных взаимодействий векторов $\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{s}$, $\boldsymbol{j}$ и $\boldsymbol{H}$. Эти отношения будут определять окончательную комбинаторику спектральных линий в магнитном поле, их расположение и поляризацию. Если на время отвлечься от того, что на самом деле вместо E_n должна фигурировать энергия тонкой структуры E_{nj}, то во всем остальном полученный результат ни в чем не уступает релятивистскому. Спин 1/2 учтен в элементарном уравнении Шредингера, использующем не спиноры, а скалярные волновые функции.

4.7 Взаимодействие спинов электрона и ядра

Достоинством математического аппарата КТПД является его способность к созданию длинных цепей последовательных формальных выводов. Примером гибкости такого рода можно считать применение операции разделения переменных, с помощью которой от универсального уравнения динамики всегда можно дойти до уравнения конкретной задачи, а в задаче – до уравнения с требуемой степенью свободы (координатой). Частью этого процесса является использование полей реакции, благодаря которому «интерференционные» слагаемые типа

$$2(\partial_\mu\psi)(\partial^\mu f), \qquad 2(\partial_\mu\psi)(\partial^\mu\sigma), \qquad 2(\partial_\mu f_1)(\partial^\mu f_2), \qquad \ldots \tag{4.36}$$

описывающие взаимодействие, формируются автоматически при разворачивании начальных производных. Далее от пользователя требуется только задать правильный вид собственных значений градиентов по отдельности или их произведений. При достаточном опыте можно научиться извлекать частные результаты, не решая уравнения в целом. Так, если ожидается, что уравнение будет громоздким, а найти надо вклад определенного взаимодействия, то нет необходимости составлять уравнение и вести все выкладки полностью. Достаточно знать «начальный вид» (4.36) слагаемого, ответственного за это взаимодействие. В качестве примера найдем взаимодействие спинов атомного ядра и электрона. В томе 1 задача о *сверхтонком расщеплении* решалась в релятивистском варианте с использованием уравнения КГФ. Сейчас мы рассмотрим ее частично и применительно к уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Delta\Psi.$$

Наличие спина электрона следует непосредственно из условия задачи. Оно требует включения в парциальный состав общего поля движения Ψ спинового поля электрона σ. То, что речь идет о финитном движении в атоме, заставляет нас ввести в Ψ также поле f реакции на воздействие со стороны ядра. Тем самым получаем минимальный состав

$$\Psi = \psi\sigma f.$$

Учет наличия спина ядра был продемонстрирован в томе 1. Он состоит в том, что в 4-потенциале ядра пространственная компонента $\boldsymbol{A}$ не равна 0, а выбирается в виде векторного потенциала магнитного диполя $\boldsymbol{\mu}_N$:

$$A^\mu = \left(\frac{Ze}{r},\, \frac{\boldsymbol{\mu}_N \times \boldsymbol{r}}{r^3}\right).$$

Происхождение $\boldsymbol{A}$ очевидно: поле вращения, каковым является поле спина ядра, не может не создавать магнитного поля, поскольку ядро электрически заряжено. В первом приближении это магнитное поле можно считать дипольным. Если через $\boldsymbol{I}$ обозначить собственный момент импульса ядра в единицах $\hbar$, то

$$\boldsymbol{\mu}_N = \mu_N \mathrm{g}_N \boldsymbol{I},$$

где μ_N – ядерный магнетон, g_N – фактор Ланде ядра. С учетом этого имеем:

$$A^\mu = \left(\frac{Ze}{r},\, \mu_N \mathrm{g}_N \frac{\boldsymbol{I} \times \boldsymbol{r}}{r^3}\right).$$

В случае уравнения Шредингера в качестве интерференционных членов (4.36) выступают произведения градиентов по обычным 3-мерным координатам. За взаимодействие спинов электрона и ядра должно отвечать слагаемое

$$W\psi\sigma f = 2(\nabla\sigma)\cdot(\nabla f)\psi.$$

Поскольку поля спинов зависят только от углов, и без ограничения общности одноименные оси всех СК можно выбрать попарно параллельными, то задачу можно рассматривать в некоторой единой сферической системе координат, полюс которой направлен, для определенности, вдоль момента импульса $\boldsymbol{I}$ ядра. Тогда

$$\nabla\sigma = \left(\frac{\partial}{\partial r},\, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta},\, \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\sigma = \left(0,\, 0,\, \frac{is_z\sigma}{r\sin\theta}\right),$$

$$\nabla f = \frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}f = \frac{i\mu_N \mathrm{g}_N e}{\hbar c}\frac{\boldsymbol{I}\times\boldsymbol{r}}{r^3}f.$$

Сферические координаты относятся к ортогональным, поэтому скалярное произведение в них может быть представлено в виде суммы попарных произведений по отдельным координатам. Поскольку r- и θ-компоненты $\nabla\sigma$ равны 0, то в скалярное произведение даст вклад только произведение φ-компонент. Обозначая $I = |\boldsymbol{I}|$ и принимая во внимание известное соотношение для векторного произведения

$$|\boldsymbol{I}\times\boldsymbol{r}| = Ir\sin\,(\boldsymbol{I} \overset{\wedge}{,} \boldsymbol{r}) = Ir\sin\theta,$$

получаем[5)]

$$W = \frac{2\mu_N g_N e}{\hbar c}\frac{(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{I})}{r^3}.$$

Это слагаемое и должно определять вклад от взаимодействия спинов электрона и ядра. Дальнейшему выяснению его величины препятствует r^3 в его знаменателе. Логичным выходом является заменить его переменное значение некоторым усредненным:

$$\langle W\rangle = \frac{2\mu_N g_N e}{\hbar c}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{I})\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle.$$

Оно объединяется с постоянной частью гамильтониана

$$\frac{2\bar{m}E}{\hbar^2} \quad\longrightarrow\quad \frac{2\bar{m}E}{\hbar^2} - \langle W\rangle\,,$$

откуда следует, что его вклад в энергию равен

$$\triangle E_{sI} = \mu_N g_N \frac{e\hbar}{\bar{m}c}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{I})\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle. \tag{4.37}$$

Среднюю величину

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle = \iiint \frac{\psi^*\psi}{r^3}\,d^3x = \frac{\alpha^3 Z^3}{ƛ^3 n^3\, l(l+1)(l+1/2)} \tag{4.38}$$

для водородоподобного атома легко найти в литературе ([2], [3]), где, как правило, она встречается для двух степеней точности в определении энергии: при бальмеровских термах или при тонкой структуре. В (4.38) она приведена для первого случая. Для решения с тонкой структурой необходимо $l(l+1)$ в знаменателе заменить на $j(j+1)$[6)].

В томе 1 задача о сверхтонком расщеплении термов, вызванном взаимодействием со спином ядра, решалась в более общем виде, поэтому в ней учитывался не только спин, но и орбитальный момент электрона. В итоге результат там содержит не $(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{I})$, а $(\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{I})$. Здесь, однако, цель изначально состояла в том, чтобы найти взаимодействие *только спинов*. Снова заметим, что точность, с которой получается $\triangle E_{sI}$, не уступает точности релятивистского решения.

[5)] Здесь мы учли, что при нашем выборе направления на полюс (ось z), совпадающим с направлением $\boldsymbol{I}$, можно записать $s_z I = \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{I}$.

[6)] Это связано с тем, что энергия по своей природе содержит добавку, пропорциональную квадрату углового момента атома. При пренебрежении спином эта добавка пропорциональна $l(l+1)$, а в полной версии – $j(j+1)$.

Литература

[1] Гламазда Д.В. Квантовая теория полей движения, т.1. – Екатеринбург: ООО Издательство и типография «Альфа Принт», 2017.

[2] Шпольский Э. В. Атомная физика. Т. II. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. – М. : Наука ; Глав. ред. физ.-мат. л-ры, 1984.

[3] Кузьмичев В. Е. Законы и формулы физики: справочник. – Киев : Наукова думка, 1989.