Лекция 6
Атом во внешних магнитном и электрическом поле

1 Атом во внешнем магнитном поле

1.1 Эффект Зеемана

Рассмотрим, как изменяются энергетические уровни в атоме, когда последний помещен во внешнее постоянное магнитное поле. Из курса атомной физики мы знаем, что такое смещение носит название зеемановского расщепления энергетических уровней.

С этой целью рассмотрим уравнение Паули. Причем потенциал $U(\vec{r})$ представляет кулоновское взаимодействие электрона с зарядом ядра (мы для простоты ограничиваемся рассмотрением водородоподобных уровней)

$$U = -\frac{Zq^2}{r}, \tag{1}$$

где r — расстояние от ядра до электрона. Кроме того, будем полагать, что магнитное поле достаточно мало и поэтому можно пренебречь членом, квадратичным по $\vec{B}$. Тогда гамильтониан примет вид

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1, \tag{2}$$

где

$$\widehat{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2M} - \frac{Zq^2}{r}, \quad \widehat{H}_1 = -\frac{q}{2Mc}\vec{B}\left(\widehat{\vec{l}} + 2\widehat{\vec{s}}\right). \tag{3}$$

В 3 M — масса электрона, а q — элементарный электрический заряд.

Ввиду того, что гамильтониан (2) не зависит от времени, будем искать стационарные решения уравнения Паули

$$\Psi(\vec{x}, t) = \exp\left\{-i\frac{Et}{\hbar}\right\}\varphi(\vec{x}), \tag{4}$$

где $\varphi(\vec{x})$ удовлетворяет следующему уравнению

$$\left(\widehat{H}_0 + \widehat{H}_1\right)\varphi(\vec{x}) = E\varphi(\vec{x}), \tag{5}$$

причем $\widehat{H}_1$ является гамильтонианом возмущения. Для определенности будем считать, что манитное поле направлено вдоль оси z: $\vec{B} = (0, 0, B)$.

При выключенном поле $\vec{B}$ решения $|njlsm\rangle$ характеризуются следующими квантовыми числами: главным квантовым числом n, полным моментом количества движения электрона j, орбитальным квантовым числом l и магнитным квантовым числом m. Энергетические уровни задаются решением уравнения Шредингера

$$\left(\widehat{H}_0 - E_{ns}\right)|njlsm\rangle = 0 \tag{6}$$

и являются вырожденными, в частности, по магнитному квантовому числу m. Это связано с тем, что гамильтониан $\widehat{H}_0$ сферически симметричен и у нас нет выделенного направления. Внешнее магнитное поле нарушает сферическую симметрию до аксиальной симметрии. В результате в нижайшем порядке теории возмущений поправка к энергетическому уровню E_{ns} будет зависить от m, т.е. вырождение по m снимается

$$\Delta E_{njlsm} = \langle njlsm|\widehat{H}_1|njlsm\rangle = -\frac{q}{2mc}B\langle njlsm|\widehat{l}_3 + 2\widehat{s}_3|njlsm\rangle. \tag{7}$$

Выразим оператор $\hat{\vec{l}}+2\hat{\vec{s}}$ через оператор полного момента количества движения $\hat{\vec{j}}=\hat{\vec{l}}+\hat{\vec{s}}$:

$$\hat{\vec{l}}+2\hat{\vec{s}}=\hat{\vec{j}}+\hat{\vec{s}}=\hat{g}\hat{\vec{j}}, \tag{8}$$

где $\hat{g}$ — некий оператор, явный вид которого нам предстоит найти. С этой целью умножим скалярно (8) справа на $\hat{\vec{j}}$

$$\hat{\vec{j}}^{\,2}+\hat{\vec{j}}\hat{\vec{s}}=\hat{g}\hat{\vec{j}}^{\,2} \tag{9}$$

или

$$\hat{g}=1+\frac{\hat{\vec{j}}\hat{\vec{s}}}{\hat{\vec{j}}^{\,2}}. \tag{10}$$

С другой стороны

$$\hat{\vec{l}}^{\,2}=\hat{\vec{j}}^{\,2}+\hat{\vec{s}}^{\,2}-2\hat{\vec{j}}\hat{\vec{s}} \tag{11}$$

Откуда

$$\hat{g}=1+\frac{\hat{\vec{j}}^{\,2}+\hat{\vec{s}}^{\,2}-\hat{\vec{l}}^{\,2}}{2\hat{\vec{j}}^{\,2}} \tag{12}$$

Волновая функция $|njlsm\rangle$ является собственной функцией как оператора $\hat{j}_3$, так и оператора $\hat{g}$. Следовательно

$$\langle njlsm|\hat{l}_3+2\hat{s}_3|njlsm\rangle=g_{jls}m, \tag{13}$$

где

$$g_{jls}=1+\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)} \tag{14}$$

называется множителем Ланде.

Для энергии имеем следующее выражение

$$E_{njlsm}=E_{nl}+\mu_{\text{Б}}g_{jls}Bm. \tag{15}$$

Таким образом, внешнее магнитное поле снимает $2j+1$–кратное вырождение уровня. Это смещение происходит симметрично относительно невозмущенного уровня. Такая картина носит название аномального эффекта Зеемана. В случае, когда $s=0$ (частица без спина) $j=l$ и $g_{ll0}=1$. При этом

$$\Delta E=\mu_{\text{Б}}Bm \tag{16}$$

Такое расщепление носит название нормального эффекта Зеемана.

Величина

$$\mu=-\frac{\partial\Delta E_{max.}}{\partial B}=\mu_{\text{Б}}g_{jls}j \tag{17}$$

называется магнитным моментом атома.

1.2 Магнитная восприимчивость

Вторая производная от добавки к энергии атома в магнитном поле с обратным знаком называется *магнитной восприимчивостью*

$$\chi = -\frac{\partial^2 \Delta E}{\partial B^2}. \tag{18}$$

Она показывает величину дополнительного магнитного момента атома, которую он приобретает за счет взаимодействия со внешним магнитным полем. В случае, когда χ является положительной величиной, говорят, что атом обладает *парамагнетизмом*, если она отрицательна, то говорят о *диамагнетизме* атома.

Рассчитаем χ в самом простом случае, когда $l = s = 0$ и, следовательно, магнитный момент равен нулю. В лекции 4 был получен гамильтониан для электрона во внешнем магнитном поле $\vec{B}$ (уравнение (30)). Видно, что благодаря последнему члену в правой части этого уравнения (который пропорционален квадрату напряженности поля B^2) магнитная восприимчивость оказывается ненулевой уже в первом порядке теории возмущений. Действительно в этом случае добавка к энергии атома будет

$$\Delta E = \frac{q^2}{8Mc^2} B^2 \langle l = 0, s = 0 | \sin^2\theta r^2 | l = 0, s = 0 \rangle \tag{19}$$

(опять считается, что поле выбрано направленным вдоль оси z). Для s–состоянии интеграл по углам вычисляется элементарно и соответствующий матричный элемент легко вражается через среднеквадратичный радиус атома

$$\langle l = 0, s = 0 | \sin^2\theta r^2 | l = 0, s = 0 \rangle = \frac{2}{3} \langle l = 0, s = 0 | r^2 | l = 0, s = 0 \rangle \equiv \frac{2}{3} \langle r^2 \rangle. \tag{20}$$

Таким образом магнитная восприимчивость оказывается отрицательной

$$\chi_{l=0} = -\frac{q^2}{6Mc^2} \langle r^2 \rangle. \tag{21}$$

Следовательно такой атом всегда обладает диамагнетизмом.

Другой интересный случай имеет место, когда $l \neq 0$, а $s = 0$. Он подробно рассмотрен в книге[1] и мы здесь приводим только окончательный результат

$$\chi_{l\neq 0} = \frac{\mu_{\text{Б}}^2}{3} \frac{l(l+1)}{kT}, \tag{22}$$

где k — постоянная Больцмана, а T — температура. В этом случае атом оказывается парамагнитным. Простая оценка показывает, что диамагнитная восприимчивость намного меньше парамагнитной и ее можно не учтиывать при рассмотрении парамагнитных свойств вещества.

2 Эффект Штарка

2.1 Качественное рассмотрение эффекта Штарка

Под действием внешнего электрического поля напряженности $\vec{E}$ стационарные уровни атома смещаются. Это явление носит название *эффекта Штарка*. Рассмотрим снача-

[1] З. Флюгге, Задачи по квантовой механике, т.1 (задача 128). М.:Мир, 1974.

ла общие свойства этого эффекта, обусловленные только свойствами симметрии. Гамильтониан электрона, который удерживается в центрально-симметричном поле $U(r)$ и находится во внешнем однородном электрическом поле, есть

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\vec{p}}^{\,2}}{2M} + U(r) - \vec{\mathcal{E}}\vec{d} = \widehat{H}_0 - \vec{\mathcal{E}}\vec{d}, \tag{23}$$

где $\vec{d} = q\vec{r}$ — оператор дипольного момента. Будем рассматривать слагаемое $-\vec{\mathcal{E}}\vec{d}$ как возмущение. При выключенном возмущении $\vec{\mathcal{E}} = 0$ гамильтониан имеет центральную симметрию и его собственные функции характеризуются главным квантовым числом n, орбитальным квантовым числом l и магнитным квантовым числом m. Далее их будем обозначать соответствующий вектор состояния $|nlm\rangle$. При этом в общем случае имеется место вырождения по магнитному квантовому числу m. Как мы знаем из курса атомной физики для случая чисто кулоновского потенциала (водородоподобные атомы) уровни энергии имеют дополнительное вырождение по орбитальному квантовому числу $|l\rangle$.

Выберем так систему координат, чтобы ось z была направлена вдоль поля $\vec{\mathcal{E}}$. Тогда возмущение

$$\widehat{H}_1 = -\vec{\mathcal{E}}\vec{d} = -qz\,|\mathcal{E}| \equiv -qz\mathcal{E} = -q\mathcal{E}r\cos\theta \tag{24}$$

и сферическая симметрия гамильтониана сужается до аксиальной симметрии. Эта симметрия выражается в том, что, во-первых, гамильтониан оказывается симметричен относительно поворотов на произвольный угол φ_0 вокруг оси z

$$\varphi \to \varphi + \varphi_0, \quad \theta \to \theta. \tag{25}$$

Во-вторых, гамильтониан оказывается инвариантен относительно отражений в любой плоскости, проходящей через ось z. В сферических координатах такому отражению соответствует дискретное преобразование

$$\varphi \to -\varphi, \quad \theta \to \theta. \tag{26}$$

Следует сказать, что если первая из этих симметрий имела место также и для атома во внешнем магнитном поле, то вторая симметрия там не имеет места. Действительно, в сферических координатах оператор $\widehat{l}_3$ выглядит как [2]

$$\widehat{l}_3 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{27}$$

и возмущение для эффекта Зеемана выглядит как (для простоты рассмотрим бесспиновый "электрон")

$$\widehat{H}_1^{\text{Зеем.}} = -\frac{\hbar}{i}\frac{q}{2Mc}B\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{28}$$

Отсюда видно, что при преобразовании (26) магнитное квантовое число и $\widehat{H}_1^{\text{Зеем.}}$ меняют знак, а возмущение для эффектра Штарка (24) остается инвариантным. Таким образом можно заключить, что в случае эффекта Штарка снятие вырождения происходит только по абсолютному значению магнитного квантового числа

$$E_{nlm} = E_{nl-m}. \tag{29}$$

[2] См., например, А.П.Кобушкин, Квантовая физика (Часть 1. Атомная физика. Киев 2000), формула (6.15).

Иными словами имеет место только *частичное снятие вырождения* по магнитному квантовому числу, а в случае эффекта Зеемана происходит *полное снятие вырождения* по магнитному квантовому числу.

Рассмотрим сдвиг уровней за счет возмущения (24) по теории возмущений. В первом порядке изменение энергии равно

$$\Delta E_{nlm} = -q\mathcal{E}\langle nlm|z|nlm\rangle. \tag{30}$$

Однако, из соображений симметрии следует, что в этом выражении подытнегральная функция по z будет нечётной и поэтому интеграл обращается в нуль

$$\langle nlm|z|nlm\rangle = -\langle nlm|z|nlm\rangle = 0. \tag{31}$$

Таким образом, а первом порядке теории возмущений сдвиг энергии оказывается равен нулю и поэтому необходимо проводить расчет во втором порядке. В итоге сдвиг уровней оказывается пропорционален квадрату напряженности поля $\mathcal{E}$. Исключение составляют водородоподобные атомы, у которого, как подчеркивалось выше, имеется дополнительное вырождение и поэтому необходимо использовать теорию возмущений для вырожденных уровней. В результате для этих атомов имеет место линейный эффект Штарка.

2.2 Линейный эффект Штарка

В качестве примера рассмотрим первый возбужденный уровень атома водорода с $n = 2$. Этот уровень имеет четырехкратное вырождение, которые отвечают четырьмя состояниями

$$|\mathrm{I}\rangle \equiv |211\rangle, |\mathrm{II}\rangle \equiv |21-1\rangle, |\mathrm{III}\rangle \equiv |210\rangle, |\mathrm{IV}\rangle \equiv |200\rangle. \tag{32}$$

Поэтому, в соответствии с общими правилами теории возмущений, мы должны уже в нулевом приближении выбрать волновую функцию в виде линейной суперпозиции

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{4} \alpha_i |i\rangle. \tag{33}$$

Для того, чтобы воспользоваться результатами предыдущей лекции необходимо вычислить матричные элементы $\langle i|z|j\rangle$ между всеми состояниями (32). На основании (31) заключаем, что диагональные элементы равны нулю. Далее, записывая соответствующие интегралы в сферической системе легко заметить также, что среди недиагональных матричных элементов отличными от нуля являются только $\langle \mathrm{III}|z|\mathrm{IV}\rangle = \langle \mathrm{IV}|z|\mathrm{III}\rangle$. Подставим сюда необходимые волновые функции

$$\langle \mathrm{III}|z|\mathrm{IV}\rangle = a\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \cos\theta Y_{10}^*(\theta,\varphi) \int_0^{\infty} d\rho\rho^3 \frac{1}{4\sqrt{3}}\left(1-\frac{\rho}{2}\right)\rho e^{-\rho}, \tag{34}$$

где введены обозначения $\rho = \frac{r}{a}$, $a = \frac{\hbar^2}{q_0^2 m}$ — боровский радиус. После несложных вычислений получим

$$\langle \mathrm{III}|z|\mathrm{IV}\rangle = -3a. \tag{35}$$

В результате система уравнений (5.38) сведется к

$$\begin{cases} \alpha_1(E_2^{(0)} - E) = 0 \\ \alpha_2(E_2^{(0)} - E) = 0 \\ \alpha_3(E_2^{(0)} - E) + 3\alpha_4 aq\mathcal{E} = 0 \\ \alpha_4(E_2^{(0)} - E) + 3\alpha_3 aq\mathcal{E} = 0 \end{cases} \tag{36}$$

где $E_2^{(0)}$ — энергия первого возбужденного уровня в атоме водорода. Откуда находим, что

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha_2 = 0 \\ \alpha_3 &= -\alpha_4 \frac{3aq\mathcal{E}}{E_2^{(0)} - E} \\ \left(E_2^{(0)} - E\right)^2 &= (3aq\mathcal{E})^2 \end{aligned} \tag{37}$$

Таким образом получается, что в нижайшем порядке теории возмущений уровень $E^{(0)}$ расщепляется на три

$$E = E_2^{(0)} \quad \text{и} \quad E_2^{(0)} \pm 3aq\mathcal{E}, \tag{38}$$

причем сдвижка энергии оказывается пропорциональна напряженности электрического поля $\mathcal{E}$ и такое расщепление называют *линейным эффектом Штарка*. При этом состояния атома $|200\rangle$ и $|210\rangle$ смешиваются, а $|21 \pm 1\rangle$ остаются неизменными.

2.3 Квадратичный эффект Штарка

Теперь рассмотрим эффект Штарка для не водородоподобных атомов. Для них сдвиг уровней происходит, начиная со второго порядка теории возмущений. При этом происходит смешивание уровней с орбитальными моментами l, отличающимися на единицу. Действительно, согласно общей теории, для состояния $|nlm\rangle$ энергия меняется на величину

$$\Delta E_{nlm}^{(2)} = \sum_{n \neq n'} \sum_{l \neq l'} \sum_{m \neq m'} \frac{\langle nlm|\widehat{H}_1|n'l'm'\rangle\langle n'l'm'|\widehat{H}_1|nlm\rangle}{E_{nl}^{(0)} - E_{n'l'}^{(0)}} \tag{39}$$

где матричный элемент записанный как интеграл в сферических координатах есть

$$\langle nlm|\widehat{H}_1|n'l'm'\rangle = -q\mathcal{E} \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cos\theta \, Y_{lm}^*(\theta,\varphi) Y_{l'm'}(\theta,\varphi). \tag{40}$$

Тогда используя свойства сферических функций сразу видим, что ненулевыми матричными элементами являются матричные элементы с $m = m'$. Это и оправывает то, что мы с самого начала не обращали внимания на вырождение спектра по магнитному квантовому числу. Далее, используя соотношение

$$\cos\theta Y_{l'm'}(\theta,\varphi) = AY_{l'+1m'}(\theta,\varphi) + BY_{l'-1m'}(\theta,\varphi) \tag{41}$$

получим следующую структуру для матричного элемента

$$\langle nlm|\widehat{H}_1|n'l'm'\rangle = \delta_{mm'} \left(\delta_{ll'+1} W_{nl}^1 + \delta_{ll'-1} W_{nl}^2\right), \tag{42}$$

где явный вид $W_{nl}^{1,2}$ мы не выписываем.

На основании приведенных выше формул видно, что смещение энергии, оказывается пропорциональным квадрату напряженности электрического поля. Такой эффект называют *квадратичным эффектом Штарка*. В применении к атому водорода, уровни состояний $|2l \pm 1\rangle$ сдвигаются за счет квадратичного эффекта Штарка.

Величина

$$\frac{\partial E}{\partial \mathcal{E}} = \alpha\mathcal{E} \tag{43}$$

имеет смысл дипольного момента, индуцированного за счет внешнего электрического поля, и называется *электрической поляризуемостью* атома.

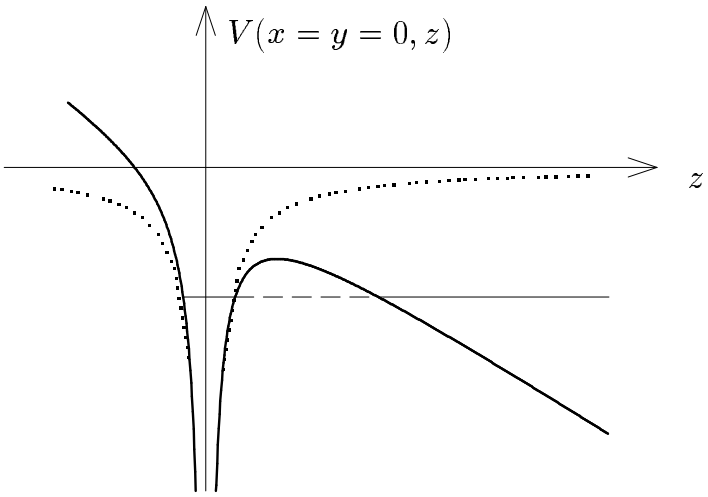

Рис. 1: Потенциал для электрона в атомк, помещенном во внешнее электрическое поле $\vec{\mathcal{E}} = (0, 0, \mathcal{E})$. Точками показан потенциал для случая, когда внешнее поле выключено.

2.4 Уширение линии для атома во внешнем электрическом поле

Из рисунка 1 очевидно, что для электрон атома во внешнем электрическом поле всегда имеет место ненулевая вероятность туннелировать в непрерывный спектр.

3 Вариационный метод Ритца

Во многих задачах бывает очень полезен вариационный метод Ритца. Для основного состояния он базируется на следующей теореме:

Среднее значение от оператора Гамильтона $\widehat{H}$ по любым функциям $\psi(\vec{x})$, нормированным на единицу, больше или равно энергии основного состояния.

Для доказательства перейдем к энергетическому представлению. При этом произвольная волновая функция может быть представлена в виде

$$\psi(\vec{x}) = \sum_n a_n \varphi_n(\vec{x}), \tag{44}$$

где $\varphi_n(\vec{x})$ собственные функции оператора $\widehat{H}$ с собственными значениями E_n. Из условия нормировки функции $\psi(\vec{x})$ на единицу получим

$$\int d^2x |\psi(\vec{x})|^2 = \sum_n |a_n|^2 = 1. \tag{45}$$

Вычислим среднее

$$\int d^3x \psi^*(\vec{x}) \widehat{H} \psi(\vec{x}) = \sum_n \sum_m a_n^* a_m \int d^3x \varphi_n^*(\vec{x}) \widehat{H} \varphi_m(\vec{x}) =$$

$$= \sum_n \sum_m a_n^* a_m \int d^3x \varphi_n^*(\vec{x}) E_m \varphi_m(\vec{x}) = \sum_n |a_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |a_n|^2 = E_0 \qquad (46)$$

Для практических целей используется следующая процедура. Берется произвольная функция $\psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n; \vec{x})$, где α_1, α_2, ... , α_n — некоторые параметры. При этом нормировка функции выбирается так, чтобы

$$\int d^3x \, |\psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n; \vec{x})|^2 = 1. \qquad (47)$$

Такая функция называется *пробной функцией*. Затем вычисляется функционал

$$R_0(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n) = \int d^3x \psi^*(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n; \vec{x}) \widehat{H} \psi(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n; \vec{x}) \qquad (48)$$

и ищется его минимум по параметрам α_1, α_2,... ,α_n, т.е. такие значения параметров $\widetilde{\alpha}_1$, $\widetilde{\alpha}_2$, ... , $\widetilde{\alpha}_n$, чтобы

$$\frac{\partial R_0}{\partial \widetilde{\alpha}_1} = 0, \ \frac{\partial R_0}{\partial \widetilde{\alpha}_2} = 0, \ \ldots, \ \frac{\partial R_0}{\partial \widetilde{\alpha}_n} = 0. \qquad (49)$$

Тогда полагаем

$$E_0 \approx R_0(\widetilde{\alpha}_1, \widetilde{\alpha}_2, \ldots, \widetilde{\alpha}_n) \text{ и } \Psi_0(\vec{x}) \approx \psi(\widetilde{\alpha}_1, \widetilde{\alpha}_2, \ldots, \widetilde{\alpha}_n; \vec{x}). \qquad (50)$$

Конечно, этот метод дает хороший результат, если удастся из каких-то соображений выбрать удачную пробную функцию. Часто бывает даже достаточно использовать однопараметрическую пробную функцию.

Для того, чтобы найти энергию для первого возбужденного состояния методом Ритца, необходимо построить пробную функцию, которая удовлетворяет двум условиям, нормировки и ортогональности к основному состоянию

$$\int d^3x \, |\psi_1(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x})|^2 = 1, \qquad (51)$$

$$\int d^3x \psi_1^*(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x}) \psi^*(\widetilde{\alpha}_1, \widetilde{\alpha}_2, \ldots, \widetilde{\alpha}_n; \vec{x}) = 0. \qquad (52)$$

В идеальном случае, когда вариационное решение совпадает с точным решением уравнения Шредингера для основного состояния $\psi(\widetilde{\alpha}_1, \widetilde{\alpha}_2, \ldots, \widetilde{\alpha}_n; \vec{x}) = \varphi_0(\vec{x})$, условие (52) означает, что в энергетическом представлении функция $\psi_1(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x})$ не содержит $\varphi_0(\vec{x})$:

$$\psi_1(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x}) = \sum_{n>0} b_n \varphi_n(\vec{x}). \qquad (53)$$

В свою очередь условие (51) накладывает следующее ограничение на коэффициенты b_n

$$\sum_{n>0} |b_n|^2 = 1. \qquad (54)$$

Тогда среднее значение гамильтониана по ψ_1 будет больше или равно E_1

$$\int d^3x \psi_1^*(\vec{x}) \widehat{H} \psi_1(\vec{x}) = \sum_{n>0} |b_n|^2 E_n \geq E_1 \sum_{n>0} |b_n|^2 = E_1. \qquad (55)$$

Следовательно, вычисляя минимум функционала

$$R_1(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n) = \int d^3x \psi_1^*(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x}) \widehat{H} \psi_1(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x}) \qquad (56)$$

можно его отождествить с энергией E_1, а $\psi_1(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n; \vec{x})$ с волновой функцией первого возбужденного состояния $\Psi_1(\vec{x})$.

Далее эту процедуру можно продолжить, строя нормированную пробную функцию для второго возбуждения и т.д.