

Лекции по квантовой механике II

Э.Т.Ахмедов

Использованная литература

- Р.Фейнман и Хиббс, Квантовая механика и интегралы по траекториям
- S.Coleman, Aspects of symmetry
- А.М.Поляков, Калибровочные поля и струны
- А.И.Тернов, Релятивистская квантовая механика...
- С.Н.Вергелес, Лекции по квантовой электродинамике...
- Райдер, Квантовая теория поля...
- Ю.Весс и Баггер, Введение в суперсимметрию
- Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц, 3й том
- Ю.М.Белоусов, Лекции по квантовой механике
- В.В.Киселев, Лекции по квантовой механике
- И.Хриплович, Теоретический калейдоскоп
- С.П.Алиллугев и К.Зяблюк, Рассеяние в квантовой механике...
- Ю.М.Белоусов, Матрица плотности...
- М.Г.Иванов, Как правильно понимать квантовую механику

Благодарю Кирилла Базарова за помощь в оформлении рисунков и Олега Исааковича Толстихина на полезные замечания.

Содержание

- I. Лекция.** *Классический и квантовый принцип Гюйгенса, T-упорядоченная экспонента, ядро оператора эволюции и его основные свойства, поворот Вика и связь свободного нестационарного уравнения Шредингера с уравнением теплопроводности, дискретизованный интеграл по путям, интеграл Гаусса.* 5
- II. Лекция.** *Норма и мера интегрирования в функциональном пространстве, ядро оператора эволюции для линейного осциллятора и для свободной частицы, вычисление функционального интеграла для осциллятора, полный базис функций оператора Лапласа на отрезке, детерминант дифференциального оператора и его смысл, различные методы регуляризации и вычисления функционального детерминанта.* 22
- III. Лекция.** *Общие замечания о квазиклассическом приближении в функциональном интеграле, расщепление уровней энергии в потенциале с двумя ямами, способ извлечения спектра энергий из ядра оператора эволюции, оценка негауссова функционального интеграла в квазиклассическом приближении для потенциала с двумя ямами, сумма по инстантам.* 38
- IV. Лекция.** *Нерелятивистский предел для уравнения Шредингера–Фока–Клейна–Гордона во внешних электромагнитных полях, калибровочная ковариантность уравнений квантовой механики, ковариантная производная, нерелятивистское уравнение во внешних электромагнитных полях для частиц со спином ноль, проблемы с вероятностной интерпретацией решения уравнения ШФКГ, уравнение Дирака, γ -матрицы, ковариантность уравнения Дирака относительно преобразований координат, грассманова алгебра фермионного осциллятора.* 55
- V. Лекция.** *Представления алгебры Лоренца, алгебра Пуанкаре и ее представления, гамильтониан Дирака, вектор Паули–Любанского, сопряженный спинор и четыре-вектор плотности потока вероятности, свободные спиноры Дирака.* 72
- VI. Лекция.** *Тензорное произведение операторов, сложение моментов, $3j$ -символы, коэффициенты Клебша–Гордана, шаровые спиноры, точный дискретный спектр уравнения Дирака в потенциале Кулона.* 87

- VI Лекция.** *Стационарная теория возмущений для невырожденного и вырожденного дискретных спектров, теория возмущений для близких уровней энергии, применение стационарной теории возмущений для вычисления поправок к спектру энергий атома гелия, ортосостояние и парасостояние, приближения Хартри и Хартри–Фока.* **104**
- VI Лекция.** *Нерелятивистский предел уравнения Дирака, уравнение Паули, релятивистские поправки к уровням энергии водородоподобного атома, локальное и спин–орбитальное взаимодействие, атом в магнитном поле, нормальный и аномальный эффекты Зеемана, эффект Пашена–Бака.* **120**
- IX Лекция.** *Представление взаимодействия, формула Кембелла–Бейкера–Хаусдорфа, общие положения нестационарной теории возмущений для дискретного спектра, соотношение неопределенностей Гейзенберга для энергии и времени, возмущение действующее долго, быстро и медленно меняющиеся возмущения для дискретного спектра, общие положения нестационарной теории возмущений для непрерывного спектра, золотое правило Ферми.* **137**
- X. Лекция.** *Фаза Берри, эффект Ааронова–Бома, взаимодействие атомов с классическим электромагнитным полем, квазистационарные состояния, борновское приближение, функция Грина для борновского приближения.* **153**
- XI Лекция.** *Постановка задачи о рассеянии, пределы применимости борновского приближения, медленные и быстрые частицы, рассеяние в центральном поле в борновском приближении, фазовая теория рассеяния (парциальные волны, амплитуды и сечения рассеяния), сферические волны, рассеяние медленных частиц в рамках фазовой теории, рассеяние тождественных частиц, оптическая теорема.* **172**
- XI Лекция.** *Вторичное квантование в модельной ситуации, квантование электромагнитного поля, взаимодействие атомов с квантовым электромагнитным полем, излучение фотонов атомами, правила отбора.* **188**
- XI Лекция.** *Матрица плотности, чистые и смешанные состояния, эксперимент Эйнштейна–Подольского–Розена, неравен-*

I. Лекция. *Классический и квантовый принцип Гюйгенса, T-упорядоченная экспонента, ядро оператора эволюции и его основные свойства, поворот Вика и связь свободного нестационарного уравнения Шредингера с уравнением теплопроводности, дискретизованный интеграл по путям, интеграл Гаусса.*

1. Как мы уже обсудили в прошлом семестре у классической механики есть, по крайней мере, четыре разных, но эквивалентных в стандартных ситуациях, формулировки: ньютоновская, лагранжева, гамильтонова и Гамильтона-Якоби. Также и у квантовой механики есть несколько разных, но эквивалентных, формулировок. С двумя из них мы уже знакомы — это волновая шредингеровская и матричная гейзенберговская. На этой и двух следующих лекциях мы разберем еще одну — в виде функционального интеграла Фейнмана.

Знание нескольких формулировок теории позволяет взглянуть на одно и то же явление со многих разных точек зрения, что дает возможность глубже понять предмет, а также облегчает его обобщение. К тому же новые формулировки теории нередко сильно облегчают решение старых задач и приводят к элегантному решению новых, которые казались очень сложными в других формулировках. Поэтому ученые и рассматривают различные подходы к квантовой и классической механике, да и к другим теориям.

Итак, вспомним интерференционный эксперимент. В нем мы имеем дело с картиной, изображенной на рис. 1, где амплитуда волны вероятности (или электромагнитного поля, в случае интенсивного света) в точке x определяется по формуле:

$$K_{0x}^{(1)} \propto e^{i\phi_{01x}} + e^{i\phi_{02x}}.$$

Здесь $\phi_{01x} = \phi_{01} + \phi_{1x}$ — это фаза волновой функции в точке x , отвечающая состоянию кванта прошедшего через первую щель, а $\phi_{02x} = \phi_{02} + \phi_{2x}$ — прошедшего через вторую щель.

Представим теперь, что у нас между источником 0 и сенсорным экраном находится много стенок. И в этих стенках много щелей, как изображено на рис. 2. Тогда интерференционная картина на экране конечно несколько изменится, но для нашего обсуждения важно, что амплитуда в точке x будет определяться по формуле:

$$K_{0x}^{(2)} \propto \sum_{\bar{\gamma}} e^{i\phi_{\bar{\gamma}}},$$

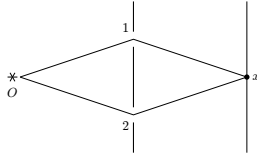


Рис. 1:

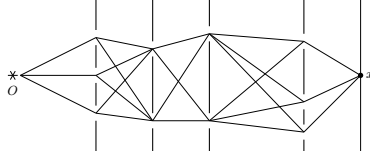


Рис. 2:

где сумма идет по всем ломанным $\bar{\gamma}$ из точки O в точку x , проходящим через всевозможные последовательности щелей в стенках; $\phi_{\bar{\gamma}}$ — это фаза волновой функции, отвечающая состоянию кванта, прошедшего по соответствующей ломанной $\bar{\gamma}$. Такая фаза является суммой отдельных вкладов, отвечающих каждому сегменту ломаной

Рассмотрим теперь предел, когда стенки заполняют все пространство между источником и экраном, а щели в них, в свою очередь, заполняют эти стенки целиком. В таком пределе мы получим, что:

$$K_{0x} \propto \sum_{\gamma} e^{i\phi_{\gamma}}, \quad (1)$$

где знак суммы здесь условный, так как она идет по всевозможным путям, γ , между O и x , как изображено на рис. 3, а каждый путь в сумме взят с весом $e^{i\phi_{\gamma}}$. Получающаяся формула определяет амплитуду вероятности обнаружить квант в точке x через суперпозицию всевозможным путей от источника — это так называемый интеграл Фейнмана. Его более или менее строгое определение является задачей этой и двух следующих лекций.

Прежде чем двигаться дальше, заметим, что описанная картина давно уже известна в волновой оптике (для интенсивного света) как принцип Гюйгенса–Френеля. Гюйгенс (старший современник Ньютона) сформулировал этот принцип эвристически, а через пару столетий Френель создал соответствующий математический аппарат, который позволяет получать, например, картины дифракции на щелях и экранах различной формы.

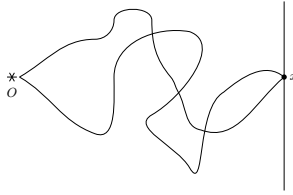


Рис. 3:

Происхождение принципа Гюйгенса–Френеля можно понять из следующих наблюдений. Волна — это колебания какой-то среды (воздуха, воды, электромагнитного поля или волны вероятности, то есть поля электрона или фотона): для определенности можно рассмотреть упругие волны в модели кубического кристалла, состоящего из шариков соединенных прижимками. Важно, что какие бы свойства у этой среды ни были (из чего бы она не состояла) если фронт волны дошел до соответствующей точки, то в ней начинают происходить колебания¹. Эти колебания можно считать источниками вторичных волн, как изображено на рис. 4. А весь волновой фронт является результатом интерференции волн от вторичных источников и т.д.. Теперь, если соединить линиями все источники первичных, вторичных, третичных и т.д. волн последовательно друг за другом, то мы получим всевозможные ломанные от источника до точки наблюдения, а в пределе малого измельчения — всевозможные пути.

Итак, описание волн в виде всевозможных путей не является чем-то необычным. Важным дополнением для волн вероятности в квантовом случае является то, что правая сторона равенства (1) интерпретируется как суперпозиция состояний кванта прошедшего по всевозможным путям.

2. Получим теперь явные формулы, которые описывают математически строго сделанные выше эвристические наблюдения. Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера:

¹ В качестве замечания в сторону подчеркнем, что на поверхности воды эти колебания однажды начавшись, продолжают некоторое время. При этом, например, в звуковой или в электромагнитной волне колебание в данной точке пространства происходит один раз. То есть, если выключить источник электромагнитной волны или звука, то они сразу пропадут. При этом, если выключить источник волн на воде, то те пропадут не сразу. Если бы звуковые волны были бы устроены также, как волны на воде, то мы не смогли бы слышать из-за продолжительного эха от каждого сигнала. Такое различие в поведении волн хорошо видно на свойствах запаздывающих функций Грина волновых уравнений в (2+1)-мерном и (3+1)-мерном пространствах. Разобраться в этом различии — хорошая задача для студента.

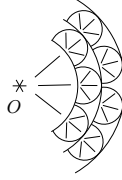


Рис. 4:

$$i \hbar \partial_t K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \hat{H}_x K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}), \quad (2)$$

с начальным условием:

$$K(t = t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}). \quad (3)$$

Здесь индекс x у оператора Гамильтона \hat{H}_x означает, что это дифференциальный оператор, действующий только на \vec{x} , тогда как \vec{y} играет роль внешнего параметра в начальном условии.

На этой лекции мы рассмотрим более общую ситуацию, чем обычно. А именно, будем считать, что гамильтониан зависит от времени. Например, потенциал (внешнее воздействие на квант) может зависеть от времени:

$$\hat{H}_x(t) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\vec{x}, t) = -\hbar^2 \frac{\Delta_x}{2m} + V(\vec{x}, t). \quad (4)$$

Решение $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ уравнения Шредингера с начальным условием (3) называется его функцией Грина или ядром оператора эволюции. (Причины таких названий станут ясны ниже.) Эта величина имеет важное значение и физический смысл. В частности она лежит в основе формулировки квантовой механики в терминах интеграла по путям, как мы увидим ниже.

Чтобы найти $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ рассмотрим решение нестационарной задачи Шредингера:

$$i \hbar \partial_t \left| \Psi(t) \right\rangle = \hat{H}(t) \left| \Psi(t) \right\rangle, \quad \left| \Psi(t = t_0) \right\rangle = \left| \Psi_0 \right\rangle. \quad (5)$$

Проинтегрировав обе стороны дифференциального уравнения по времени от t_0 до t , получим:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau) |\Psi(\tau)\rangle, \quad (6)$$

где учтено начальное условие на $|\Psi(t)\rangle$.

Формально мы представили дифференциальное уравнение (5) в интегральной форме, ведь справа стоит та же неизвестная величина $|\Psi(t)\rangle$, что и слева. Подставим под интеграл на правой стороне (6) само выражение для $|\Psi(\tau)\rangle$ в форме (6). В таком случае мы получим:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= |\Psi_0\rangle + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t d\tau_1 \hat{H}(\tau_1) |\Psi_0\rangle + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t d\tau_1 \hat{H}(\tau_1) \int_{t_0}^{\tau_1} \hat{H}(\tau_2) |\Psi(\tau_2)\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

Заметим, что порядок расположения $\hat{H}(\tau_1)$ и $\hat{H}(\tau_2)$ на правой стороне последнего соотношения важен, так как $\hat{H}(t)$ взятый в два разных момента времени — это фактически два разных оператора, которые не обязательно коммутируют друг с другом: $[\hat{H}(\tau_1), \hat{H}(\tau_2)] \neq 0$. В каждом члене суммы $\hat{H}(\tau_k)$ стоит всегда левее $\hat{H}(\tau_j)$, если $\tau_j < \tau_k$.

Итерирование выражения (7) наводит на мысль, что ответ для задачи (5) нужно искать в виде:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \hat{U}(t, t_0) |\Psi_0\rangle \equiv \\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_1) \dots \hat{H}(\tau_n) |\Psi_0\rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

где порядок расположения $\hat{H}(\tau_i)$, $i = \overline{1, n}$ важен опять же из-за возможных нетривиальных коммутационных соотношений между ними. Обратите также внимание на пределы интегрирования по τ_i в (7) и (8).

Чтобы убедиться в том, что (8) решает задачу (5), обсудим некоторые свойства оператора

$$\hat{U}(t, t_0) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_1) \dots \hat{H}(\tau_n).$$

Рассмотрим сначала ситуацию, когда гамильтониан \hat{H} не зависит от времени. В этом случае:

$$\int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H} \dots \hat{H} = \hat{H}^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n = \frac{\hat{H}^n (t - t_0)^n}{n!},$$

и мы получаем, что

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t - t_0) = e^{-i \frac{\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}}.$$

То есть $\hat{U}(t, t_0)$ сводится к знакомому нам с прошлого семестра оператору эволюции, как и должно быть. Мы же здесь нашли его обобщение на ситуации, когда гамильтониан зависит от времени $\hat{H}(t)$. Поэтому по аналогии оператор эволюции записывается как

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_1) \dots \hat{H}(\tau_n) \equiv \\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} T \left[\int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau) \right]^n \equiv T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)}, \end{aligned} \quad (9)$$

где выражения в нижней строке содержат так называемое T-упорядочение (или упорядочение по времени), а самое правое выражение в этой цепочке равенств называется T-упорядоченной экспонентой и определяется просто как сумма в верхней строчке.

Заметим, что в случае если гамильтониан меняется во времени, в теории нет трансляционной инвариантности и поэтому $\hat{U}(t, t_0) \neq \hat{U}(t - t_0)$. Если же гамильтониан не зависит от времени, то трансляционная инвариантность есть и поэтому оператор эволюции зависит от разности начального и конечного моментов: $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t - t_0)$.

Заметим также, что если оператор Гамильтона является эрмитовым $\hat{H}^+(t) = \hat{H}(t)$, то оператор эволюции оказывается унитарным. А именно, в этом случае можно показать, что

$$\hat{U}^+(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1},$$

где

$$\begin{aligned} \hat{U}^+(t, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_n) \dots \hat{H}(\tau_1) \equiv \\ &\equiv \bar{T} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)}. \end{aligned} \quad (10)$$

Теперь в каждом члене суммы $\hat{H}(\tau_k)$ стоит всегда правее $\hat{H}(\tau_j)$, если $\tau_j < \tau_k$. Здесь \bar{T} обозначает так называемое обратное упорядочение по времени. Оператор $\hat{U}^+(t, t_0)$ возникает, например, в определении решения следующей нестационарной задачи Шредингера с заданным начальным условием:

$$i \hbar \partial_t \langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t) | \hat{H}(t), \quad \langle \Psi(t = t_0) | = \langle \Psi_0 |.$$

Действительно, тогда можно показать, что:

$$\langle \Psi(t) | = \langle \Psi_0 | \hat{U}^+(t, t_0).$$

Убедимся теперь, что выражение (8) решает задачу (5). Во-первых, нетрудно видеть, что

$$|\Psi(t = t_0)\rangle = \hat{U}(t_0, t_0) |\Psi_0\rangle = |\Psi_0\rangle,$$

так как $\hat{U}^+(t_0, t_0) = \hat{1}$. То есть начальное условие действительно выполнено. Во-вторых, имеем:

$$\begin{aligned} & i \hbar \partial_t \left(T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} \right) = \\ & = i \hbar \partial_t \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t d\tau_1 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_1) \dots \hat{H}(\tau_n) = \\ & = \hat{H}(t) \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^{n-1} \int_{t_0}^t d\tau_2 \dots \int_{t_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{H}(\tau_2) \dots \hat{H}(\tau_n) = \\ & = \hat{H}(t) \left(T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} \right). \end{aligned}$$

Откуда сразу следует, что выражение $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi_0\rangle$ решает дифференциальное уравнение (5).

Вернемся теперь к задаче (2), (3). Покажем, что ее решением является выражение вида:

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle = \langle \vec{x} | T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} | \vec{y} \rangle. \quad (11)$$

То есть фактически $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ является матричным элементом оператора эволюции $\hat{U}(t, t_0)$ между состояниями $|\vec{x}\rangle$ и $|\vec{y}\rangle$

Действительно, при $t = t_0$ мы получаем начальное условие

$$K(t = t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \langle \vec{x} | \hat{\mathbf{1}} | \vec{y} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}).$$

Далее,

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) &= \langle \vec{x} | i \hbar \partial_t \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle = \\ &= \langle \vec{x} | \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle = \hat{H}_x(t) K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}), \end{aligned}$$

то есть нестационарное уравнение Шредингера (2) тоже выполнено.

3. Из формулы (11) сразу можно понять физический смысл $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$. Действительно, рассмотрим квант, который в начальный момент времени, t_0 , находится в точке \vec{y} , то есть в состоянии $|\vec{y}\rangle$. Далее, как мы знаем, это состояние меняется во времени по закону

$$|\vec{y}, t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\vec{y}\rangle.$$

Тогда величина

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \langle \vec{x} | \hat{U}(t, t_0) | \vec{y} \rangle$$

определяет амплитуду вероятности найти квант в момент времени t в состоянии $\langle \vec{x} |$. Иными словами, $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ — это амплитуда вероятности найти квант в состоянии $\langle \vec{x} |$ в момент времени t , если в момент времени t_0 он находился в состоянии $|\vec{y}\rangle$.

Далее, используя $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ можно вычислить амплитуду вероятности перехода между двумя любыми состояниями. Например, пусть в начальный момент времени, t_0 , квант находился в состоянии $|\psi_1\rangle$, а мы хотим вычислить амплитуду вероятности найти его в момент времени t в состоянии $|\psi_2\rangle$. Ответ по определению дается выражением:

$$A_{12} = \langle \psi_2 | T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} | \psi_1 \rangle,$$

которое можно преобразовать к виду:

$$\begin{aligned} A_{12} &= \int d^3 \vec{x} \int d^3 \vec{y} \langle \psi_2 | | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau)} | \vec{y} \rangle \langle \vec{y} | | \psi_1 \rangle = \\ &= \int d^3 \vec{x} \int d^3 \vec{y} \psi_2^*(\vec{x}) K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) \psi_1(\vec{y}), \quad (12) \end{aligned}$$

где мы дважды использовали условие полноты $\int d^3 \vec{x} | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | = \hat{\mathbf{1}}$. Именно поэтому $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ называется (интегральным) ядром оператора эволюции.

Наконец, используя $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ можно найти решение нестационарного уравнения Шредингера с произвольным начальным условием:

$$i \hbar \partial_t \Psi(t, \vec{x}) = \hat{H}(t) \Psi(t, \vec{x}), \quad \Psi(t = t_0, \vec{x}) = \Psi_0(\vec{x}).$$

Действительно, нетрудно показать, что решением данной задачи является функция вида:

$$\Psi(t, \vec{x}) = \int d^3 \vec{y} K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) \Psi_0(\vec{y}),$$

в чем студенту предлагается убедиться самостоятельно, положив в этом выражении $t = t_0$ и отдельно применив к нему дифференциальный оператор $i \hbar \partial_t$. Из этих наблюдений должно быть ясно почему $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ называется функцией Грина нестационарного уравнения Шредингера.

4. Перейдем теперь к обсуждению некоторых важных свойств ядра оператора эволюции, которые позволяют сформулировать математически принцип Гюйгенса–Френеля. А именно, покажем следующее интегральное соотношение:

$$\int d^3 \vec{z} K(t_2, t_1 | \vec{x}, \vec{z}) K(t_1, t_0 | \vec{z}, \vec{y}) = K(t_2, t_0 | \vec{x}, \vec{y}), \quad (13)$$

где очевидно подразумевается, что $t_2 > t_1 > t_0$. Действительно,

$$\begin{aligned} & \int d^3 \vec{z} K(t_2, t_1 | \vec{x}, \vec{z}) K(t_1, t_0 | \vec{z}, \vec{y}) = \\ &= \int d^3 \vec{z} \langle \vec{x} | \hat{U}(t_2, t_1) | \vec{z} \rangle \langle \vec{z} | \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{y} \rangle = \\ &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) | \vec{y} \rangle = \\ &= \langle \vec{x} | \hat{U}(t_2, t_0) | \vec{y} \rangle = K(t_2, t_0 | \vec{x}, \vec{y}), \end{aligned}$$

где мы использовали условие полноты $\int d^3 \vec{z} | \vec{z} \rangle \langle \vec{z} | = \hat{\mathbf{1}}$ и следующее свойство оператора эволюции:

$$\hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) \equiv T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} d\tau \hat{H}(\tau)} T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} d\tau \hat{H}(\tau)} =$$

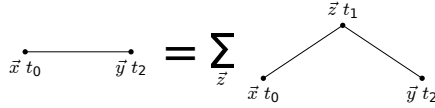


Рис. 5:

$$= T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_2} d\tau \hat{H}(\tau)} \equiv \hat{U}(t_2, t_0).$$

Оно очевидно совпадает с простым свойством экспоненты в случае, если гамильтониан не зависит от времени:

$$\hat{U}(t_2 - t_1) \hat{U}(t_1 - t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2 - t_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1 - t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_2 - t_0)} = \hat{U}(t_2 - t_0)$$

Если же гамильтониан зависит от времени, студентам предлагается убедиться в его верности самостоятельно.

На самом деле даже само соотношение (13) тоже является простым следствием и обобщением следующего очевидного свойства матричной экспоненты:

$$\sum_{k=1}^N \left(e^{t_1 \hat{A}} \right)_j^k \left(e^{t_2 \hat{A}} \right)_k^l = \left(e^{(t_1 + t_2) \hat{A}} \right)_j^l.$$

Действительно, если индексы j, k, l становятся непрерывными, то из суммы мы получаем интеграл, а из матриц \hat{A} операторы. Остается лишь обобщить это соотношение на случай T-упорядоченной экспоненты, когда линейный оператор зависит от времени, $\hat{A}(t)$.

Наконец, соотношение (13) имеет следующий физический смысл. Чтобы вычислить амплитуду вероятности перехода кванта из состояния \vec{y} в момент времени t_0 в состояние \vec{x} в момент времени t_2 , можно помножить амплитуду перехода из \vec{y} в \vec{z} на амплитуду перехода из \vec{z} в \vec{x} , с нахождением в \vec{z} в какой-то промежуточный момент времени t_1 , и просуммировать по всем возможным промежуточным состояниям \vec{z} .

Графически обсуждаемая в предыдущем абзаце процедура, и соотношение (13), соответственно, представляются простейшим графиком Фейнмана, который изображен на рис. 5. Нетрудно заметить, что свойство изображенное на этом рисунке является элементарным кирпичиком для формулировки принципа Гюйгенса–Френеля, как мы убедимся чуть ниже.

5. Прежде чем двигаться дальше, сделаем одно важно замечание в сторону. В теории вероятностей имеется полный аналог соотно-

шения (13), который лежит в основе так называемых марковских процессов и носит имя Колмогорова (и многих других ученых). Эта связь между марковскими процессами в статистической физике и динамикой волновой функции в квантовой механике не является случайной. Обсудим ее на простейшем примере.

Рассмотрим ядро оператора эволюции для свободной частицы, когда

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\hbar^2 \frac{\Delta}{2m}.$$

Очевидно в этом случае рассматриваемая нестационарная задача Шредингера принимает вид:

$$i \partial_t K(t|\vec{x}, \vec{y}) = -\frac{\hbar \Delta}{2m} K(t|\vec{x}, \vec{y}), \quad K(t=0|\vec{x}, \vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}), \quad (14)$$

где мы положили $t_0 = 0$ и учли, что в обсуждаемом случае $K(t, t_0|\vec{x}, \vec{y}) = K(t - t_0|\vec{x}, \vec{y})$, так как сейчас в задаче имеется трансляционная инвариантность по времени.

Сделаем теперь замену² $t \rightarrow -it$, где $i \equiv \sqrt{-1}$, в уравнении (14). В результате такой процедуры нестационарная квантовомеханическая задача Шредингера (14) перейдет в статистическую задачу теплопроводности:

$$\partial_t \bar{K}(t|\vec{x}, \vec{y}) = \kappa \Delta \bar{K}(t|\vec{x}, \vec{y}), \quad \bar{K}(t=0|\vec{x}, \vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}), \quad (15)$$

где коэффициент теплопроводности имеет вид $\kappa = \frac{\hbar}{2m}$. Рассматриваемое дифференциальное уравнение с начальным условием (15) описывает, например, расплывание в воде капли краски, которая была брошена в точку \vec{y} в момент времени $t = 0$. Расплывание происходит за счет броуновского движения частиц краски в воде. Тепло тоже распространяется по такому закону в некотором приближении.

В результате мы опять имеем ситуацию, когда вроде одна и та же формула (13) фактически описывает разные физические процессы. Оказывается, что многие задачи квантовой физики имеют аналоги в

²Если необходимо, то для большей математической строгости можно рассмотреть уравнение (14) в комплексной плоскости t и сделать поворот (аналитическое продолжение) в этой плоскости от действительной к мнимой оси. В квантовой теории поля такая процедура называется поворотом Вика. Фактически здесь мы имеем дело с аналитическим продолжением функции Грина $K(t|\vec{x}, \vec{y})$ в комплексную плоскость t .

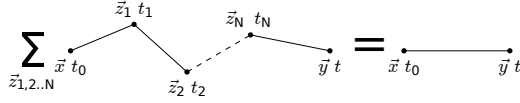


Рис. 6:

статистической механике и наоборот. И отображение между ними в простейших стационарных ситуациях (когда в задаче есть трансляционная инвариантность по времени) получается при помощи поворота Вика $t \rightarrow -it$. Мы используем эти наблюдения на следующих двух лекциях.

6. Повторим теперь N раз такую процедуру разбиения как изображена на рис. 5 и проделана в уравнении (13) (см. рис. 6). Это фактически то же самое, что мы делали при обсуждении принципа Гюйгенса–Френеля. В результате

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \int \dots \int d^3 \vec{z}_N \dots d^3 \vec{z}_1 K(t, t_N | \vec{x}, \vec{z}_N) \dots K(t_1, t_0 | \vec{z}_1, \vec{y}), \quad (16)$$

где мы получаем $N+1$ промежуточных звеньев (ядер $K(t_{j+1}, t_j | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j)$) в произведении под интегралом, если промежуточных точек \vec{z}_j (и соответственно интегрирований) имеется N штук. Подчеркнем еще раз, что $t_0 < t_1 < \dots < t_N < t$.

Возьмем теперь предел $N \rightarrow \infty$ и $(t_{j+1} - t_j) \rightarrow 0$ (для всех j) так чтобы величина $t - t_0 = \sum_{j=1}^N (t_{j+1} - t_j)$, $t_{N+1} = t$ оставалась конечной. Чтобы понять, что мы получим в результате на правой стороне (16), найдем приближенное значение $K(t_{j+1}, t_j | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j)$, в пределе $(t_{j+1} - t_j) \rightarrow 0$.

Для очень короткого промежутка времени $\Delta t_j = t_{j+1} - t_j \rightarrow 0$, мы имеем:

$$\begin{aligned} K(t_{j+1}, t_j | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j) &\equiv \left\langle \vec{z}_{j+1} \left| T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_j}^{t_{j+1}} d\tau \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}, \tau) \right]} \right| \vec{z}_j \right\rangle \approx \\ &\approx \left\langle \vec{z}_{j+1} \left| e^{-\frac{i \Delta t_j}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}, t_j) \right]} \right| \vec{z}_j \right\rangle \approx \\ &\approx \left\langle \vec{z}_{j+1} \left| e^{-\frac{i \Delta t_j}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m}} e^{-\frac{i \Delta t_j}{\hbar} V(\hat{q}, t_j)} \right| \vec{z}_j \right\rangle. \quad (17) \end{aligned}$$

Здесь на последнем шаге мы сделали неочевидное приближение. Дело в том, что верно следующее равенство

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} + \dots$$

для любых двух операторов \hat{A} и \hat{B} . В предыдущем семестре было такое упражнение. На следующих лекциях мы докажем еще более общее и полное соотношение.

Для нас важно, что из этих наблюдений следует равенство:

$$e^{-\frac{i\Delta t_j}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q}, t_j) \right]} = e^{-\frac{i\Delta t_j}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m}} e^{-\frac{i\Delta t_j}{\hbar} V(\hat{q}, t_j)} \times e^{-\frac{\Delta t_j^2}{\hbar} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}, V(\hat{q}, t_j) \right]} + \mathcal{O}(\Delta t_j^3)$$

Последний множитель на правой стороне этого соотношения стремится к единице быстрее первых двух в пределе $\Delta t_j \rightarrow 0$, так как содержит вторую степень Δt_j , а не первую.

Итак, используя условие полноты $\int d^3\vec{p} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \hat{\mathbf{1}}$, из (17) мы получаем, что

$$\begin{aligned} & K(t_{j+1}, t_j | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j) \approx \\ & \approx \left\langle \vec{z}_{j+1} \left| e^{-\frac{i\Delta t_j}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m}} \int d^3\vec{p} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| e^{-\frac{i\Delta t_j}{\hbar} V(\hat{q}, t_j)} \right| \vec{z}_j \right\rangle = \\ & = \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i\Delta t_j}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{i\vec{p}(\vec{z}_{j+1} - \vec{z}_j)}{\hbar} - \frac{i\Delta t_j}{\hbar} V(\vec{z}_j, t_j)} = \\ & = \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\Delta t_j} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(\vec{z}_{j+1} - \vec{z}_j)^2}{2\Delta t_j^2} - V(\vec{z}_j, t_j) \right] \Delta t_j}, \end{aligned} \quad (18)$$

где мы применили операторы \hat{p} и \hat{q} к их собственным состояниям $|\vec{p}\rangle$ и $|\vec{z}_j\rangle$, соответственно, и использовали, что

$$\langle \vec{p} | \vec{z}_j \rangle = \frac{e^{\frac{i\vec{p}\vec{z}_j}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}, \quad \langle \vec{z}_{j+1} | \vec{p} \rangle = \frac{e^{-\frac{i\vec{p}\vec{z}_{j+1}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}},$$

как было показано в прошлом семестре. На последнем шаге мы взяли гауссов интеграл по $d^3\vec{p}$. В приложении в конце этой лекции объясняется, как берутся такие интегралы.

Итак, мы получаем следующее приближенное равенство:

$$K(\Delta t_j \rightarrow 0 | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j) \approx \left(\frac{m}{i2\pi\hbar\Delta t_j} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m(\vec{z}_{j+1} - \vec{z}_j)^2}{2\Delta t_j^2} - V(\vec{z}_j, t_j) \right] \Delta t_j}. \quad (19)$$

Воспользовавшись этим выражением на правой стороне под интегралом в формуле (16), мы получаем, что

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \int \dots \int \prod_{j=1}^N d^3 \vec{z}_j \left(\frac{m}{i 2 \pi \hbar \Delta t_j} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{m}{i 2 \pi \hbar \Delta t_{N+1}} \right)^{\frac{3}{2}} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\vec{z}_{k+1} - \vec{z}_k}{\Delta t_k} \right)^2 - V(\vec{z}_k, t_k) \right] \Delta t_k \right\}, \quad (20)$$

где в экспоненте подразумевается, что $\vec{z}_0 \equiv \vec{y}$, а $\vec{z}_{N+1} \equiv \vec{x}$. Таким образом, в пределе $N \rightarrow \infty$ получается бесконечно кратный интеграл вида:

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \int_{\vec{z}(t_0)=\vec{y}, \vec{z}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) e^{\frac{iS[\vec{z}(\cdot)]}{\hbar}}, \\ S[\vec{z}(\cdot)] = \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} - V(\vec{z}, \tau) \right]. \quad (21)$$

Сравнивая это выражение с (1), мы находим, что путь γ задается отображением $\vec{z}(\tau) : [t_0, t] \rightarrow \mathbb{R}^3$, а фаза для каждого пути равна $\phi_\gamma = \frac{S[\vec{z}(\cdot)]}{\hbar}$, то есть определяется классическим действием для данной траектории $\vec{z}(\tau)$.

Нередко (21), с описанной процедурой его получения, считается определением функционального интеграла Фейнмана. Однако на наш взгляд (21) с той мерой интегрирования, которую мы здесь получили,

$$\mathcal{D}\vec{z}(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N d^3 \vec{z}_j \left(\frac{m}{i 2 \pi \hbar \Delta t_j} \right)^{\frac{3}{2}},$$

не является функциональным интегралом в правильном смысле.

Дело в том, что здесь интегрирование ведется по образу отображения $\vec{z}(\tau) : [t_0, t] \rightarrow \mathbb{R}^3$, а не по самим функциям $\vec{z}(\tau)$. В частности такое определение интеграла Фейнмана не возможно обобщить на случай квантовой теории поля — на функциональный интеграл по полям, а не по траекториям. Правильное определение интеграла по функциям $\vec{z}(\tau)$ (правильную меру интегрирования $\mathcal{D}\vec{z}(\tau)$) мы разберем на следующей лекции. Именно оно и обобщается на квантовую теорию поля.

Подчеркнем, что в фейнмановской формулировке квантовой механики постулируется интеграл по путям, а уравнение Шредингера выводится. Здесь же мы в некотором смысле вывели функциональный интеграл из уравнения Шредингера.

7. Приложение о гауссовом интеграле. Разберем теперь, как вычислять интегралы вида:

$$Z(\hat{A}, \vec{J}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^N dx_j e^{-A_{kl} x_k x_l - J_n x_n}, \quad (22)$$

где по повторяющимся индексам в экспоненте подразумевается суммирование, а также мы считаем, что все собственные значения матрицы \hat{A} строго больше нуля. Заметим, что фактически матрица \hat{A} является симметричной, так как $Z(\hat{A}, \vec{J})$ от ее антисимметричной части не зависит. Действительно, ведь произведение $x_k x_l$ является симметричным при перестановке k и l .

Прделаем следующие преобразования с выражением в экспоненте:

$$\begin{aligned} A_{kl} x_k x_l + J_n x_n &= A_{kl} x_k x_l + J_n A_{nk}^{-1} A_{kl} x_l = \\ &= A_{kl} \left(x_k x_l + \frac{1}{2} J_n A_{nk}^{-1} x_l + \frac{1}{2} J_n A_{nl}^{-1} x_k \right) = \\ &= A_{kl} \left[\left(x_k + \frac{1}{2} J_n A_{nk}^{-1} \right) \left(x_l + \frac{1}{2} J_m A_{ml}^{-1} \right) - \frac{1}{4} J_n A_{nk}^{-1} J_m A_{ml}^{-1} \right] = \\ &= A_{kl} X_k X_l - \frac{1}{4} J_n A_{nk}^{-1} J_k, \end{aligned}$$

где мы использовали симметричность A_{kl} , а на последнем шаге мы раскрыли квадратные скобки и ввели обозначение $X_k = x_k + \frac{1}{2} J_n A_{nk}^{-1}$.

Таким образом, интеграл (22) представляется в виде:

$$Z(\hat{A}, \vec{J}) = e^{\frac{1}{4} \vec{J}^T \hat{A}^{-1} \vec{J}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^N dX_j e^{-A_{kl} X_k X_l},$$

где мы сделали замену переменной интегрирования $X_k = x_k + \frac{1}{2} J_n A_{nk}^{-1}$.

Чтобы взять интеграл по dX_j , сделаем ортогональный поворот матрицы \hat{A} к диагональному виду и прделаем соответствующую замену переменных интегрирования:

$$\hat{M}^T \hat{A} \hat{M} = \text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N), \quad Y_k = M_{kl} X_l, \quad \hat{M}^T \hat{M} = \hat{\mathbf{1}}.$$

Тогда, так как $\det \hat{M} = 1$, то якобиан замены от X_j к Y_j равен единице, и мы получаем, что

$$\begin{aligned} Z(\hat{A}, \vec{J}) &= e^{\frac{1}{4} \vec{J}^T \hat{A}^{-1} \vec{J}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{j=1}^N dY_j e^{-\sum_{k=1}^N \lambda_k Y_k^2} = \\ &= \sqrt{\frac{\pi^N}{\prod_{k=1}^N \lambda_k}} e^{\frac{1}{4} \vec{J}^T \hat{A}^{-1} \vec{J}}, \end{aligned}$$

где мы взяли N независимых интегралов вида:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dY e^{-\lambda Y^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}, \quad \lambda > 0, \quad (23)$$

и учли, что все λ_k больше нуля, как мы условились выше.

Вспоминая, что $\prod_{k=1}^N \lambda_k = \det \hat{A}$, находим окончательный ответ для искомого интеграла:

$$Z(\hat{A}, \vec{J}) = \frac{\pi^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det \hat{A}}} e^{\frac{1}{4} \vec{J}^T \hat{A}^{-1} \vec{J}}. \quad (24)$$

Однако в основной части лекции нам пришлось брать немного иной интеграл, который содержал мнимую единицу в экспоненте. В этом случае алгоритм действий тот же самый и вся задача сводится на последнем шаге к взятию интегралов вида:

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} dY e^{-i\lambda Y^2},$$

вместо (23). Чтобы понять как работать с такими интегралами, надо сделать сдвиг $\lambda \rightarrow \lambda - i\epsilon$, $\epsilon > 0$. После чего интеграл станет очевидно сходящимся и его можно взять так же как и (23). Ответ будет следующим:

$$I(\lambda - i\epsilon) = \sqrt{\frac{\pi}{\epsilon + i\lambda}}.$$

Теперь нетрудно взять предел $\epsilon \rightarrow 0$. Здесь, однако, есть неоднозначность в знаке у \sqrt{i} : в данном случае в комплексной плоскости выбирается такой лист, что знак у этого корня положительный.

II. Лекция. *Норма и мера интегрирования в функциональном пространстве, ядро оператора эволюции для линейного осциллятора и для свободной частицы, вычисление функционального интеграла для осциллятора, полный базис функций оператора Лапласа на отрезке, детерминант дифференциального оператора и его смысл, различные методы регуляризации и вычисления функционального детерминанта.*

1. На прошлой лекции мы получили следующее выражение для амплитуды перехода из t_0, \vec{y} в t, \vec{x} :

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \mathcal{N} \int_{\vec{z}(t_0)=\vec{y}, \vec{z}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) e^{\frac{iS[\vec{z}(\cdot)]}{\hbar}},$$

$$S[\vec{z}(\cdot)] = \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} - V(\vec{z}, \tau) \right], \quad (25)$$

где \mathcal{N} — это некоторый нормировочный множитель, который, как мы увидим, зависит от выбора меры интегрирования $\mathcal{D}\vec{z}(\tau)$. Он не должен зависеть от \vec{x} и \vec{y} . Иначе утверждение о связи ядра оператора эволюции с интегралом по путям окажется тривиальным — всегда можно подобрать функцию \mathcal{N} от t, t_0, \vec{x} и \vec{y} так, чтобы равенство (25) выполнялось.

На прошлой лекции мы получили, что мера должна иметь вид:

$$\mathcal{D}\vec{z}(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N d^3 z_j \left(\frac{m N}{i 2 \pi \hbar (t - t_0)} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (26)$$

В данном случае $\mathcal{N} = 1$. Здесь мы использовали, что $\Delta t_j = (t - t_0)/N$. Нередко эту меру берут при больших, но конечных N и работают с данным интегралом прямо в дискретной формулировке, которая была определена на прошлой лекции.

Но у данной формулировки функционального интеграла, как мы обсудили в конце прошлой лекции, есть два принципиальных и связанных друг с другом недостатка. Во-первых, такой интеграл не вполне понятно как обобщать на случай полей, так как не ясно, что, например, такое $\mathcal{D}\phi(t, \vec{x})$, скажем для скалярного поля. Исходя из каких соображений определять эту величину, если теперь у нас нет уравнения Шредингера для волновых функционалов от полей? Во-вторых,

в (26) интеграл берется по образам отображений $\vec{z}(\tau) : [t_0, t] \rightarrow \mathbb{R}^3$, а не по самим отображениям, то есть не по функциям $\vec{z}(\tau)$. Наша задача на этой и следующей лекциях разобраться, как можно определить меру интегрирования по функциям $\mathcal{N}\mathcal{D}\vec{z}(\tau)$ и научиться работать с интегралом (25) в этом случае.

Проблема в том, что математически строгие формулировки интеграла по путям крайне не удобны в применении к конкретным вычислениям. Тогда как удобная для вычислений формулировка страдает от ряда логических противоречий. Мы здесь обсудим удобную формулировку и соответствующие противоречия.

2. Чтобы понять как определить интеграл по функциям $\mathcal{N}\mathcal{D}\vec{z}(\tau)$ — по объему в континуальном векторном пространстве, рассмотрим пример интегрирования по объему в обычном N -мерном векторном пространстве с метрикой:

$$dl^2 = g_{ij}(x) dx^i dx^j, \quad i = \overline{1, N}. \quad (27)$$

Как мы показали в прошлом семестре, когда обсуждали уравнение Шредингера для криволинейных координат, в этом случае соответствующая форма объема определяется как:

$$dV = \sqrt{\det g_{ij}(x)} \prod_{k=1}^N dx_k, \quad (28)$$

и не зависит от выбора координат в этом пространстве. Наша задача обобщить (27) и (28) на континуальную ситуацию.

Обычно предполагается, что расстояние в пространстве функций, аналог (27), должно удовлетворять нескольким важным свойствам. А именно, метрика должна:

- быть римановой;
- уважать симметрии в задаче;
- быть ультралокальной.

Разберем эти свойства и норму (расстояние в пространстве функций) подробно на конкретном примере. Простейшая форма расстояния между близкими функциями $\vec{z}(\tau)$ и $\vec{z}(\tau) + \delta\vec{z}(\tau)$, где $|\delta\vec{z}(\tau)| \ll |\vec{z}(\tau)|$, которая удовлетворяет перечисленным свойствам, выглядит следующим образом:

$$dL^2 = \int_0^t d\tau |\delta\vec{z}(\tau)|^2, \quad \delta\vec{z}(0) = \delta\vec{z}(t) = 0. \quad (29)$$

Свойство римановости заключается в том, что расстояние всегда не меньше нуля и равно нулю только для одинаковых функций: $dL^2 = 0$ только, если $\delta\vec{z}(\tau) = 0$. А также под интегралом (который заменяет суммирование по индексам при переходе от конечномерного векторного пространства к континуальному) стоит квадрат разности между функциями — квадрат $\delta\vec{z}(\tau)$. Например, выражение $|\delta\vec{z}(\tau)|^4$ под интегралом нарушало бы условие римановости.

Далее, обсуждаемая норма уважает симметрии, присутствующие в задаче. В данном случае единственная явная симметрия — это вращение в трех-мерном пространстве. При этом, например, норма

$$d\bar{L}^2 = \int_0^t d\tau \left(\vec{V}(\tau), \delta\vec{z}(\tau) \right)^2,$$

нарушает вращательную симметрию, так как в ней присутствует явная зависимость от какого-то векторного поля $\vec{V}(\tau)$.

Наконец, требование ультралокальности запрещает наличие производных от $\delta\vec{z}(\tau)$ под интегралом в (29). Однако наличие таких производных в мере могло бы оказаться необходимым в случае присутствия репераметризационной инвариантности в задаче, как это может случиться в ситуации с релятивистской частицей.

3. Чтобы научиться работать с интегралом (25), в котором форма объема $\mathcal{N} \mathcal{D}\vec{z}(\tau)$ следует из метрики (нормы) (29), мы явно вычислим ядро оператора эволюции $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ для конкретного случая. А именно, мы сделаем это для одномерного линейного осциллятора, когда:

$$S[z(\cdot)] = \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m \dot{z}^2}{2} - \frac{m \omega^2 z^2}{2} \right]. \quad (30)$$

Для этого разложим переменную интегрирования в (25) следующим образом:

$$z(\tau) = z_{cl}(\tau) + q(\tau), \quad (31)$$

где $q(\tau)$ — произвольная функция с граничными условиями: $q(0) = q(t) = 0$, а $z_{cl}(\tau)$ решает уравнение движения для осциллятора

$$\ddot{z}_{cl} = -\omega^2 z_{cl}, \quad (32)$$

с граничными условиями³ $z_{cl}(0) = y$, $z_{cl}(t) = x$. Это решение, как нетрудно проверить, имеет вид:

$$z_{cl}(\tau) = \frac{x - y \cos(\omega t)}{\sin(\omega t)} \sin(\omega \tau) + y \cos(\omega \tau). \quad (33)$$

Такое разделение как (31) означает, что

$$dL^2 = \int_0^t d\tau |\delta q(\tau)|^2$$

и

$$\mathcal{D}z(\tau) = \mathcal{D}q(\tau),$$

ведь $z_{cl}(\tau)$ — это заданная функция, тогда как $q(\tau)$ — новая функциональная переменная интегрирования. Здесь мы сталкиваемся с функциональным аналогом следующей замены переменной интегрирования в обычном интеграле: при вычислении интеграла $\int_{z_0}^{\infty} dz \dots$ мы можем сделать замену $z = z_0 + q$ и перейти к $\int_0^{\infty} dq \dots$

После подстановки (31) в действие для осциллятора (30), под знаком экспоненты в функциональном интеграле (25) мы получаем:

$$S[z(\cdot)] = S[z_{cl}(\cdot)] + \int_0^t d\tau \left[\frac{m \dot{q}^2}{2} - \frac{m \omega^2 q^2}{2} \right], \quad (34)$$

где $S[z_{cl}(\cdot)]$ — это действие вычисленное для экстремальной траектории $z_{cl}(\tau)$. После подстановки (33) в (30) можно найти, что:

$$S[z_{cl}(\cdot)] = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy]. \quad (35)$$

Заметим, что в (34) отсутствует линейный вклад по $q(\tau)$. Этот вклад имеет вид:

³Заметим, что в такой ситуации суммарная функция $z(\tau)$ удовлетворяет граничным условиям $z(0) = y$ и $z(t) = x$, как и должно быть при взятии функционального интеграла (25).

$$\int_0^t d\tau \left. \frac{\delta S[z(\cdot)]}{\delta z(\tau)} \right|_{z(\tau)=z_{cl}(\tau)} \times q(\tau),$$

и равен нулю, так как $z_{cl}(\tau)$ решает уравнение движение, ведь:

$$\left. \frac{\delta S[z(\cdot)]}{\delta z(\tau)} \right|_{z(\tau)=z_{cl}(\tau)} = m (\ddot{z}_{cl} + \omega^2 z_{cl}) = 0.$$

Таким образом, для ядра оператора эволюции из (25) мы получаем:

$$K_\omega(t|x, y) = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} S[z_{cl}(\cdot)]} \int_{q(0)=q(t)=0} \mathcal{D}q(\tau) e^{\frac{im}{2\hbar} \int_0^t d\tau (q^2 - \omega^2 q^2)}. \quad (36)$$

Заметим, что в рассматриваемой ситуации гамильтониан не зависит от времени и поэтому $K_\omega(t, 0|x, y) = K_\omega(t - 0|x, y) = K_\omega(t|x, y)$.

Оставшийся функциональный интеграл по $q(\tau)$ зависит только от t (и параметров m и \hbar), но не зависит от x и y . Чтобы вычислить его, разложим функцию $q(\tau)$ по полному базису собственных мод одномерного оператора Лапласа, $-d^2/d\tau^2$, на отрезке $[0, t]$ с нулевыми граничными условиями:

$$-\frac{d^2}{d\tau^2} f_n(\tau) = \lambda_n f_n(\tau), \quad f_n(0) = f_n(t),$$

$$\int_0^t d\tau f_n(\tau) f_k(\tau) = \delta_{nk}. \quad (37)$$

Решая дифференциальное уравнение с начальными условиями в верхней строчке (37), нетрудно убедиться, что

$$\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{t}\right)^2, \quad f_n(\tau) = \sqrt{\frac{2}{t}} \sin\left(\frac{\pi n}{t} \tau\right), \quad (38)$$

а множитель $\sqrt{2/t}$ необходим для выполнения условий нормировки.

Итак, разложение в ряд Фурье произвольной функции $q(\tau)$, зануляющейся на концах отрезка $[0, t]$, имеет вид:

$$q(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n f_n(\tau),$$

а разные $q(\tau)$ очевидно отвечают различным наборам коэффициентов Фурье $\{a_n\}$. Поэтому

$$\delta q(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \delta a_n f_n(\tau),$$

и, соответственно, выражение для расстояния между функциями принимает вид:

$$\begin{aligned} dL^2 &\equiv \int_0^t d\tau |\delta q(\tau)|^2 = \int_0^t d\tau \sum_{n=1}^{\infty} \delta a_n f_n(\tau) \sum_{k=1}^{\infty} \delta a_k f_k(\tau) = \\ &= \sum_{n,k} \delta a_n \delta a_k \int_0^t d\tau f_n(\tau) f_k(\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} (\delta a_n)^2. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались условием ортонормированности мод из (37).

Полученная метрика в пространстве функций означает, что мера интегрирования (форма объема) в функциональном пространстве имеет вид:

$$\mathcal{D}z(\tau) = \mathcal{D}q(\tau) = \prod_{n=1}^{\infty} da_n. \quad (39)$$

То есть мы получили, что мера интегрирования в интеграле по путям просто совпадает с мерой объема в бесконечномерном векторном пространстве, каковым и является пространство функций.

Далее выразим действие через коэффициенты Фурье:

$$\begin{aligned} S[q(\cdot)] &\equiv \frac{m}{2} \int_0^t d\tau [\dot{q}^2 - \omega^2 q^2] = \\ &= \frac{m}{2} \int_0^t d\tau \left[q \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} q \right) - \omega^2 q^2 \right] = \\ &= \frac{m}{2} \int_0^t d\tau \left[\sum_{n=1}^{\infty} a_n f_n \sum_{k=1}^{\infty} a_k \left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 f_k - \omega^2 \left(\sum_{n=1}^{\infty} a_n f_n(\tau) \right)^2 \right] = \\ &= \frac{m}{2} \sum_{n,k} \left[\left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n a_k \int_0^t d\tau f_n(\tau) f_k(\tau) = \\ &= \frac{m}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_k^2, \quad (40) \end{aligned}$$

где на первом шаге мы взяли интеграл $d\tau$ по частям и использовали граничные условия $q(0) = q(t) = 0$.

Итак, собирая вместе (36), (39) и (40), мы получаем бесконечно-кратный интеграл, определяющий ядро оператора эволюции:

$$K_\omega(t|x, y) = \mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} S[z_{cl}(\cdot)]} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{n=1}^{\infty} da_n \exp \left\{ \frac{i m}{2 \hbar} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 - \omega^2 \right] a_k^2 \right\}. \quad (41)$$

Здесь мы фактически имеем бесконечное произведение интегралов Гаусса, которые мы научились вычислять в конце прошлой лекции. В результате получаем, что:

$$K_\omega(t|x, y) = \frac{\mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} S[z_{cl}(\cdot)]}}{\sqrt{\prod_{k=1}^{\infty} \frac{i m}{2 \pi \hbar} \left[\left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 - \omega^2 \right]}}. \quad (42)$$

В знаменателе полученного выражения, с точностью до бесконечное число раз повторяющегося множителя $\frac{1}{\pi}$, стоит произведение всех собственных значений оператора

$$\hat{A} = \frac{i m}{2 \hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega^2 \right), \quad (43)$$

действующего на функции на отрезке $[0, t]$ с нулевыми граничными условиями на его концах. То есть фактически вместо (42) мы можем написать:

$$K_\omega(t|x, y) = \frac{\mathcal{N} e^{\frac{i}{\hbar} S[z_{cl}(\cdot)]}}{\sqrt{\det \left[\frac{i m}{2 \pi \hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega^2 \right)_{[0, t]} \right]}}, \quad (44)$$

где индекс $[0, t]$ у оператора \hat{A} подчеркивает, что мы рассматриваем его на пространстве функций зануляющихся на концах этого отрезка. Здесь стоит подчеркнуть, что как правило нормировочную константу \mathcal{N} убирают в определение детерминанта в знаменателе, но мы будем

оставлять ее явно, чтобы был ясен смысл происходящих преобразований.

Сделанное наблюдение придает следующий смысл гауссовому функциональному интегралу:

$$\begin{aligned}
 & \int_{q(0)=q(t)=0} \mathcal{D}q(\tau) e^{\frac{i m}{2 \hbar} \int_0^t d\tau (q^2 - \omega^2 q^2)} = \\
 & = \int_{q(0)=q(t)=0} \mathcal{D}q(\tau) e^{\frac{i m}{2 \hbar} \int_0^t d\tau q(\tau) \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega^2 \right) q(\tau)} = \\
 & = \frac{1}{\sqrt{\det \left[\frac{i m}{2 \pi \hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega^2 \right)_{[0,t]} \right]}}, \tag{45}
 \end{aligned}$$

а нам остается вычислить детерминант дифференциального оператора — бесконечной матрицы в функциональном пространстве.

Такой детерминант легче вычислить после поворота Вика, $\tau \rightarrow -i\tau$. В этом случае нам придется иметь дело с ядром оператора теплопроводности во внешнем поле $V(z) = \frac{m\omega^2 z^2}{2}$. Продолав абсолютно такие же выкладки как те, что были проведены только что, получим:

$$\bar{K}_\omega(t|x, y) = \frac{\mathcal{N} e^{-\frac{S[z_{cl}(\cdot)]}{\hbar}}}{\sqrt{\prod_{k=1}^{\infty} \frac{m}{2 \pi \hbar} \left[\left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 + \omega^2 \right]}}, \tag{46}$$

где $-S[z_{cl}(\cdot)]$ получается из $iS[z_{cl}(\cdot)]$ в (35) заменой $t \rightarrow -it$.

Заметим, что $\bar{K}_\omega(t|x, y)$ в отличие от $K_\omega(t|x, y)$ является действительной функцией.

4. Итак, теперь наша задача свелась к вычислению детерминанта дифференциального оператора:

$$\det \left[\frac{m}{2 \pi \hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right)_{[0,t]} \right] = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{m}{2 \pi \hbar} \left[\left(\frac{\pi k}{t} \right)^2 + \omega^2 \right]. \tag{47}$$

Наивно эта величина является бесконечной, что связано с наличием мод $f_k(\tau)$ со сколь угодно большими частотами $k \rightarrow \infty$ — верхний предел в произведении на правой стороне (47).

Обсуждаемая расходимость детерминанта (47) связана с наличием траекторий, которые гнутся сколь угодно сильно. В реальной ситуации таких траекторий не бывает, так как квантовая механика должна терять свою применимость на очень коротких временах — при очень высоких скоростях и ускорениях движения частицы. Действительно, очень высокие частоты в (47) отвечают уже ультрарелятивистскому поведению квантов.

Мы здесь сталкиваемся с частным случаем ситуации общего положения — любая естественнонаучная теория имеет пределы применимости. А наличие сколь угодно больших частот является общей проблемой в квантовой теории.

Таким образом, наша задача — это определить (47) так, чтобы вклад сколь угодно больших частот или коротких промежутков времени ($\pi k/t \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$ или $t/N \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$) как-то сокращался, а ответ не зависел от способа этого сокращения.

В квантовой теории есть несколько мнемонических правил, которые позволяют это сделать. Все они еще ждут своего логически непротиворечивого обоснования. Поэтому мы здесь постараемся изложить сразу несколько разных способов.

Первый способ основан на следующем наблюдении. Дело в том, что в математике известна формула:

$$\prod_{k=1}^{\infty} \left[1 + \left(\frac{\omega t}{\pi k} \right)^2 \right]^{-1} = \frac{\omega t}{\text{sh}(\omega t)}, \quad (48)$$

которая доказывается следующим образом. Левая и правая стороны данного соотношения — это мероморфные функции в полной комплексной плоскости t (включая бесконечность), которые имеют одни и те же полюса ($\omega t = i\pi k$, $k \in Z$, $k \neq 0$) и вычеты в них. По теореме Коши такие функции могут отличаться только на константу (целую функцию на полной комплексной плоскости), которую можно найти, задав любое удобное значение t . В результате соотношение (48) легко проверяется.

Нетрудно видеть, что структуры (47) и (48) совпадают с точностью до бесконечного произведения. Однако вместо того, чтобы определять соответствующий бесконечный множитель, мы немного видоизменим аргументацию. А как работать с бесконечными множителями, мы обсудим в конце этой лекции.

Пусть нам необходимо вычислить детерминанты двух эрмитовых операторов вида:

$$\hat{A}_{1,2} = -\frac{d^2}{d\tau^2} + w_{1,2}(\tau),$$

на отрезке $[0, t]$. Здесь $w_{1,2}(\tau)$ — это некоторые ограниченные функции от τ (потенциал в уравнении Шредингера).

Рассмотрим решение следующих уравнений на отрезке $[0, t]$:

$$\left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + w_{1,2}(\tau) \right] \psi_\lambda^{(1,2)}(\tau) = \lambda \psi_\lambda^{(1,2)}(\tau), \quad (49)$$

с граничными условиями вида:

$$\psi_\lambda^{(1,2)}(0) = 0, \quad \frac{d}{d\tau} \psi_\lambda^{(1,2)}(0) = 1.$$

Очевидно, что для некоторых дискретных наборов $\lambda_n^{(1,2)}$ будут выполняться условия $\psi_{\lambda_n}^{(1,2)}(t) = 0$. Действительно, при финитном движении на отрезке $[0, t]$ спектр решений уравнения Шредингера является дискретным, так как на этом отрезке должно укладываться целое число полуволн, как мы обсудили в прошлом семестре. Причем, так как рассматриваемые операторы эрмитовы, то спектры $\lambda_n^{(1,2)}$ состоят из действительных чисел и ограничены снизу.

Покажем, что

$$\det \left[\frac{-\frac{d^2}{d\tau^2} + w_1(\tau) - \lambda}{-\frac{d^2}{d\tau^2} + w_2(\tau) - \lambda} \right]_{[0,t]} = \frac{\psi_\lambda^{(1)}(t)}{\psi_\lambda^{(2)}(t)}, \quad (50)$$

где детерминант посчитан на пространстве функций на отрезке $[0, t]$, с нулевыми граничными условиями на его концах, как мы условились выше.

Действительно, левая сторона этого соотношения может быть представлена как

$$\det \left[\frac{-\frac{d^2}{d\tau^2} + w_1(\tau) - \lambda}{-\frac{d^2}{d\tau^2} + w_2(\tau) - \lambda} \right]_{[0,t]} = \frac{\prod_{n=1}^{\infty} (\lambda - \lambda_n^{(1)})}{\prod_{n=1}^{\infty} (\lambda - \lambda_n^{(2)})}.$$

То есть левая сторона (50) — это мероморфная функция на комплексной плоскости λ с нулями в $\lambda_n^{(1)}$ и полюсами в $\lambda_n^{(2)}$, которые лежат на

действительной оси по правую сторону от наименьшего из обоих спектров. Левая сторона (50) стремится к единице в любом направлении в комплексной плоскости λ , кроме положительной оси (из-за наличия сколь угодно больших значений в спектрах $\lambda_n^{(1,2)}$).

Как нетрудно видеть тоже самое верно и для правой стороны (50), ведь $\psi_\lambda^{(1,2)}(t) = 0$ при $\lambda = \lambda_n^{(1,2)}$, как мы обсудили после уравнения (49). Таким образом, равенство (50) следует из теоремы Коши.

Итак, если выбрать $\lambda = 0$ в (50), то мы получим, что⁴:

$$\frac{\det \left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + w(\tau) \right]_{[0,t]}}{\psi_0(t)} = \text{const} \quad (51)$$

— не зависит от выбора $w(\tau)$ в обозначенном выше классе ограниченных функций на отрезке $[0, t]$.

Вернемся теперь к нашему оператору (43) и выберем нормировку ψ_0 и включим множитель \mathcal{N} в определение нормировки детерминанта так, чтобы справа соответствующего соотношения (51) стояла константа $2\pi\hbar/m$. В конкретном обсуждаемом случае, когда $w = \omega^2$, мы получаем, что решение уравнения (49) с $\lambda = 0$ равно

$$\psi_0(t) = \frac{\text{sh}(\omega t)}{\omega}.$$

Поэтому искомый детерминант равен:

$$\det \left[\frac{m}{2\pi\hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) \right]_{[0,t]} = \frac{2\pi\hbar \text{sh}(\omega t)}{m\omega}, \quad (52)$$

что, после подстановки в (46), дает искомое выражение для ядра оператора теплопроводности:

$$\bar{K}_\omega(t|x, y) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \text{sh}(\omega t)}} e^{-\frac{S[z_{cl}(\cdot)]}{\hbar}}. \quad (53)$$

А после замены $t \rightarrow it$ (при обратном повороте Вика) мы получаем:

$$K_\omega(t|x, y) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}} e^{i \frac{S[z_{cl}(\cdot)]}{\hbar}}, \quad (54)$$

⁴Как правило, однако, проблема в том, что константа в этом соотношении наивно равна бесконечности. Как работать с такой ситуацией, мы разберем чуть ниже.

— искомое ядро оператора эволюции, где $S[z_{cl}(\cdot)]$ определено в (35).

5. Чтобы убедиться, что полученное выражение действительно решает нестационарную задачу Шредингера с начальным условием:

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t K_\omega(t|x, y) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) K_\omega(t|x, y), \\ K_\omega(t=0|x, y) &= \delta(x - y), \end{aligned} \quad (55)$$

можно проверить, что (54) удовлетворяет соотношению:

$$K_\omega(t_1 + t_2|x, y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz K_\omega(t_2|x, z) K_\omega(t_1|z, y), \quad (56)$$

которое мы вывели на прошлой лекции. В верности этого равенства для (54) можно убедиться прямым вычислением, используя (35) и взяв гауссов интеграл по dz . Также нетрудно проверить, что для (54) выполняется начальное условие в (55). Оставляем эти вычисления студентам, как домашнее упражнение.

В качестве дополнительной проверки заметим, что в пределе $\omega \rightarrow 0$ ядро оператора эволюции (54) сводится к

$$K_0(t|x - y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{i \frac{m|x-y|^2}{2\hbar t}}, \quad (57)$$

что должно быть ядром оператора эволюции для свободной частицы. Его можно прямо получить, решив нестационарную задачу Шредингера с начальным условием для свободной частицы:

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t K_0(t|x - y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} K_0(t|x - y), \\ K_0(t=0|x - y) &= \delta(x - y). \end{aligned} \quad (58)$$

Заметим, что в этом случае есть трансляционная инвариантность в пространстве, так как потенциал равен нулю. По этой причине $K_0(t|x, y) = K_0(t|x - y)$.

Чтобы проверить (57), решим задачу (58). Если подставить в (58) разложение в интеграл Фурье:

$$K_0(t|x-y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip(x-y)}{\hbar}} \tilde{K}_0(t|p), \quad (59)$$

то на компоненты Фурье задача сведется к

$$i \partial_t \tilde{K}_0(t|p) = \frac{\hbar p^2}{2m} \tilde{K}_0(t|p), \quad \tilde{K}_0(t=0|p) = 1.$$

Решение этих уравнений имеет вид:

$$\tilde{K}_0(t|p) = e^{-i \frac{p^2}{2m\hbar} t}.$$

Если подставить последнее выражение в (59) и взять гауссов интеграл по dp , то получится как раз (57). Все это подтверждает, что ответ (54) для ядра оператора эволюции линейного осциллятора является верным.

Наконец, заметим, что при замене $t \rightarrow -it$ в (57) мы получаем ядро оператора теплопроводности:

$$\bar{K}_0(t|x-y) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}} e^{-\frac{m|x-y|^2}{2\hbar t}}.$$

Его график, как функции от x имеет вид гауссова колокола с центром в y , высотой $\sim 1/\sqrt{t}$ и шириной $\sim \sqrt{t}$. Именно подобная функция и описывает, например, расплывание капли краски в воде.

6. Чтобы глубже разобраться с функциональным интегралом, обсудим и другие способы определения детерминантов дифференциальных операторов. А именно, вычислим для простоты детерминант (47) в случае, когда⁵ $\omega = 0$. То есть нам надо вычислить бесконечное произведение вида:

$$\begin{aligned} \det \left[\frac{m}{2\pi\hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} \right) \right]_{[0,t]} &= \prod_{n=1}^{\infty} \frac{m\pi}{2\hbar} \left(\frac{n}{t} \right)^2 = \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\pi}{2\hbar}} \frac{1}{t} \right)^{2 \sum_{n=1}^{\infty} 1} e^{2 \sum_{n=1}^{\infty} \log(n)}, \end{aligned} \quad (60)$$

⁵ Аналогичным способом можно вычислить “бесконечную” константу отличающую детерминант (47) от выражения (48).

где бесконечным суммам $\sum_{n=1}^{\infty} 1$ и $\sum_{n=1}^{\infty} \log(n)$ придается смысл через аналитическое продолжение⁶ с использованием ζ -функции Римана:

$$\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}. \quad (61)$$

У этой функции имеется единственный полюс в точке $z = 1$ в комплексной плоскости z . Соответственно, единственная сумма, которая действительно расходится — это $\sum_{n=1}^{\infty} 1/n$. При этом, зная значение функции (61) на действительной оси при любом $z > 1$ (там, где ряд (61) сходится), можно определить значение ряда при любом другом значении z , как раз через аналитическое продолжение $\zeta(z)$: фактически мы просто обходим полюс $z = 1$ в комплексной плоскости z , а не упираемся в него двигаясь вдоль действительной оси.

Например, наивно расходящаяся сумма $\sum_{n=1}^{\infty} n^{38}$ определяется как вполне конечное (возможно комплексное) значение $\zeta(-38)$. Математически строгий смысл такой процедуре придается в книге Харди “Расходящиеся ряды”, которая написана математиком в начале XX века, то есть задолго до того, как физики столкнулись с подобным явлением.

Итак, исходя из этой процедуры:

$$\sum_{n=1}^{\infty} 1 \equiv \zeta(0) = -\frac{1}{2}, \quad \sum_{n=1}^{\infty} \log n \equiv -\zeta'(0), \quad |\zeta'(0)| < \infty. \quad (62)$$

В результате мы получаем, что:

$$\det \left[\frac{m}{2\pi\hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} \right) \right]_{[0,t]} = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi m}} e^{-2\zeta'(0)} \times t. \quad (63)$$

Это приводит к следующему выражению для ядра оператора теплопроводности:

$$\bar{K}_0(t|x-y) = \mathcal{N} \left(\frac{2\hbar}{\pi m} \right)^{-\frac{1}{4}} e^{\zeta'(0)} \frac{-\frac{m|x-y|^2}{2\hbar t}}{\sqrt{t}}, \quad (64)$$

⁶ Аналитическое продолжение — это фактически нахождение единственного решения уравнения $\partial f / \partial \bar{z} = 0$ с заданным граничным условием на действительной оси.

которое, при очевидном выборе \mathcal{N} , не зависящем от t , x и y , приводит к полученному выше выражению для ядра оператора теплопроводности, а после замены $t \rightarrow it$ — к ядру оператора эволюции для свободной частицы.

Еще один способ работы с бесконечными частотами заключается в определении ряда геометрической прогрессии:

$$g(\epsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\epsilon} = \frac{1}{1 - e^{-\epsilon}}. \quad (65)$$

Введение $e^{-\epsilon}$ обрезает вклад бесконечных частот при $\epsilon > 0$. В квантовой теории эта операция называется регуляризацией. Очевидно, что данная функция в комплексной плоскости ϵ имеет полюс в нуле, что и определяет конечный радиус сходимости обсуждаемого ряда геометрической прогрессии.

Теперь заметим, что в пределе $\epsilon \rightarrow 0$ из (65) мы получим ряд $\sum_{n=1}^{\infty} 1$, сумма которого в таком случае определяется из соотношения:

$$1 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\epsilon} = g(\epsilon)|_{\epsilon \rightarrow 0} = \frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{2} + \mathcal{O}(\epsilon),$$

и поэтому равна⁷

$$\sum_{n=1}^{\infty} e^{-n\epsilon} = \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} + \mathcal{O}(\epsilon)$$

где и виден полюс в нуле. От этой бесконечности в выражении для ядра оператора эволюции или теплопроводности можно избавиться, если подобрать $\mathcal{N} \sim t^{1/\epsilon}$. Таким образом, в данной ситуации нормировочный множитель явно зависит от t , хотя и не зависит от x и y .

7. В квантовой теории от таких расходимостей как $1/\epsilon$, $\epsilon \rightarrow 0$, связанных с наличием бесконечных частот избавляются при помощи так называемой процедуры перенормировки. Точнее, для этого используется так называемый метод ренормализационной группы, выходящий далеко за рамки нашего курса, однако имеющий ясный физический смысл, который мы попробуем сейчас пояснить.

Идея этого метода, который в простейшем случае квантовой механики реализуется в очень урезанном виде, может быть сформулирована следующим образом. Дело в том, что в соотношении:

⁷Здесь важно заметить, что конечный вклад в обсуждаемую сумму, $-1/2$, (та его часть, которая в данном разложении имеет порядок ϵ^0) не зависит от способа регуляризации, то есть универсален. Это имеет принципиальное значение.

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \int \dots \int d^3 \vec{z}_N \dots d^3 \vec{z}_1 K(t, t_N | \vec{x}, \vec{z}_N) \dots K(t_1, t_0 | \vec{z}_1, \vec{y}) \quad (66)$$

мы не знаем явно $K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y})$ для произвольного вида потенциала $V(z, \tau)$ при произвольных значениях t и t_0 . Однако, как мы видели на прошлой лекции, можно найти $K(t_{j+1}, t_j | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j)$ явно при любом потенциале для очень коротких промежутков времени $t_{j+1} - t_j \rightarrow 0$. И это выражение имеет вид:

$$K(t_{j+1}, t_j | \vec{z}_{j+1}, \vec{z}_j) \propto e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_j}^{t_{j+1}} d\tau L}, \quad \Delta t_j \rightarrow 0,$$

где L — это исходный классический лагранжиан в теории.

Теперь, по аналогии можно предположить, что для конечных промежутков времени с левой стороны соотношения (66) тоже стоит какое-то выражение вида:

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t_0} d\tau L_{eff}},$$

где L_{eff} уже не совпадает с классическим лагранжианом, если потенциал не является квадратичной функцией от координаты: только если функциональный интеграл является гауссовым, то лагранжиан не меняет своего вида при увеличении размера промежутка времени в аргументе ядра оператора эволюции. Мы обсудим это подробнее на следующей лекции.

Этот лагранжиан L_{eff} как-то меняется при изменении размера промежутка времени, $t - t_0$, от очень короткого (высокие частоты) к очень длинному. Метод нахождения этих видоизменений связан с процедурой вычитания очень коротких промежутков $\Delta t_j \sim \epsilon$ и с методом ренормализационной группы.

Возможно, однако, здесь стоит подчеркнуть, что в квантовой теории поля ситуация несколько сложнее описанной здесь для квантовой механики и следить удается только для очень специального вида вкладов в L_{eff} .

III. Лекция. *Общие замечания о квазиклассическом приближении в функциональном интеграле, расщепление уровней энергии в потенциале с двумя ямами, способ извлечения спектра энергий из ядра оператора эволюции, оценка негауссова функционального интеграла в квазиклассическом приближении для потенциала с двумя ямами, сумма по инстантонам.*

1. Точно вычислить функциональный интеграл удается в очень специальных ситуациях. Например, в той, когда он является гауссовым, как это было на прошлой лекции. В связи с этим необходима разработка приближенных методов вычисления интеграла по путям. Функциональный интеграл удобен в применении в квазиклассическом приближении и в нестационарной теории возмущений. На этой лекции мы обсудим вычисления интеграла по путям в квазиклассическом приближении для некоторого потенциала. А применение интеграла Фейнмана к теории возмущений будет рассмотрено на другой лекции.

Вспомним ситуацию, в которой обычный интеграл можно взять методом перевала или стационарной фазы — то, что обсуждалось в прошлом семестре. А именно:

$$\int_a^b dz f(z) e^{i\lambda S(z)} \Big|_{\lambda \rightarrow \infty} \approx \sum_{j=1}^N \sqrt{\frac{\pi}{i\lambda S''(z_j)}} f(z_j) e^{i\lambda S(z_j)}, \quad (67)$$

где z_j , $j = \overline{1, N}$ — это экстремумы функции $S(z)$, то есть $S'(z_j) = 0$, на интервале $[a, b]$. При этом конечно подразумеваются все необходимые свойства функций $f(z)$ и $S(z)$ для работы соотношения (67).

Пусть, соответственно, теперь нам необходимо взять функциональный интеграл в пределе $\lambda \sim \frac{1}{\hbar} \rightarrow \infty$ (в соответствующих единицах):

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \mathcal{N} \int_{\vec{z}(t_0)=\vec{y}, \vec{z}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) e^{\frac{iS[\vec{z}(\cdot)]}{\hbar}},$$

$$S[\vec{z}(\cdot)] = \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m\dot{\vec{z}}^2}{2} - V(\vec{z}, \tau) \right]. \quad (68)$$

Для строгого математического определения этой процедуры следует обращаться к работам Гельфанда и Яглома. Мы же здесь, как обычно, будем избегать чрезмерной формализации.

В пределе $\hbar \rightarrow 0$, действуя также как при выводе формулы (67), разложим действие $S[\vec{z}(\cdot)]$ вокруг его экстремума:

$$\vec{z}(\tau) = \vec{z}_{cl}(\tau) + \vec{q}(\tau),$$

где, как мы знаем из курса классической механики и теории поля, условие на $\vec{z}_{cl}(\tau)$ определяется как:

$$\delta S \equiv \int_{t_0}^t d\tau \left. \frac{\delta S[\vec{z}(\cdot)]}{\delta \vec{z}(\tau)} \right|_{\vec{z}(\tau) = \vec{z}_{cl}(\tau)} \times \delta \vec{z}(\tau) = 0.$$

Тогда разложение действия $S[\vec{z}(\cdot)]$ вокруг этого экстремума имеет вид:

$$S[\vec{z}(\cdot)] = S[\vec{z}_{cl}(\cdot)] + \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m\dot{\vec{q}}^2}{2} - \frac{1}{2} \partial_j \partial_k V(\vec{z}_{cl}, \tau) q_j q_k + \mathcal{O}(q^3) \right], \quad (69)$$

где $j, k = \overline{1, 3}$ и отсутствует линейный вклад по \vec{q} . Заметим, что, в отличие от предыдущей лекции, теперь в выражении

$$\Delta S[\vec{z}_{cl}, \vec{q}(\cdot)] \equiv \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m\dot{\vec{q}}^2}{2} - \frac{1}{2} \partial_j \partial_k V(\vec{z}_{cl}, \tau) q_j q_k + \mathcal{O}(q^3) \right].$$

мы можем иметь вклады содержащие более высокие степени \vec{q} , чем вторая⁸. Это связано с тем, что потенциал $V(\vec{z}, \tau)$ не обязательно является квадратичной функцией от \vec{z} .

Однако, в пределе $\hbar \rightarrow 0$ вклады в интеграл (68) от колебаний \vec{q} с большой амплитудой сокращаются из-за быстрых осцилляций экспоненты $e^{\frac{i\Delta S[\vec{z}_{cl}, \vec{q}(\cdot)]}{\hbar}}$. Тогда основной вклад в интеграл дают малые значения \vec{q} . Ситуация абсолютно аналогична той, что возникала при вычислении интеграла (67).

Утверждение о подавленности больших колебаний \vec{q} особенно ясно видно после поворота Вика $\tau \rightarrow -i\tau$. Действительно, в таком случае для колебаний \vec{q} большой амплитуды величина $\Delta S[\vec{z}_{cl}, \vec{q}(\cdot)]$ оказывается тоже большой, а экспонента $e^{-\frac{\Delta S[\vec{z}_{cl}, \vec{q}(\cdot)]}{\hbar}}$, соответственно, маленькой. Это и приводит к подавлению вкладов в интеграл от больших значений $|\vec{q}|$.

⁸Заметим мимоходом, что в случае осциллятора (гауссовой теории с линейными уравнениями движения) действие $\Delta S[z_{cl}, q(\cdot)]$ не зависело от z_{cl} , так как в том случае $V'''(z_{cl}, \tau) = m^2$.

В свете всего здесь сказанного в пределе $\hbar \rightarrow 0$ мы можем отбросить высокие степени \vec{q} в (69). В результате, следует, что:

$$\begin{aligned}
 K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) &\approx \sum_{a=1}^N e^{\frac{i S[\vec{z}_{cl}^{(a)}(\cdot)]}{\hbar}} \mathcal{N} \int_{\vec{q}(t_0)=\vec{q}(t)=0} \mathcal{D}\vec{q}(\tau) \times \\
 &\times \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t d\tau q_j \left[m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta_{jk} + \partial_j \partial_k V(\vec{z}_{cl}^{(a)}, \tau) \right] q_k \right\} = \\
 &= \sum_{a=1}^N \frac{\mathcal{N} e^{\frac{i S[\vec{z}_{cl}^{(a)}(\cdot)]}{\hbar}}}{\sqrt{\det \left\{ -\frac{i}{2\pi\hbar} \left[m \frac{d^2}{d\tau^2} \delta_{jk} + \partial_j \partial_k V(\vec{z}_{cl}^{(a)}, \tau) \right]_{[t_0, t]} \right\}}}, \quad (70)
 \end{aligned}$$

где a нумерует экстремумы $\vec{z}_{cl}^{(a)}$ действия $S[\vec{z}(\cdot)]$ в том случае, если их много. Заметим, что на первом шаге в этой цепочке равенств мы проинтегрировали по частям в $\Delta S[\vec{z}_{cl}, \vec{q}(\cdot)]$ и использовали граничные условия $\vec{q}(t_0) = \vec{q}(t) = 0$, а на последнем шаге взяли гауссов функциональный интеграл по $\mathcal{D}\vec{q}(\tau)$.

Полученное выражение (70) является функциональным аналогом соотношения (67) для обычных интегралов. Поправки к (70) вычисляются аналогично тому, как это делается для (67).

Из полученного выражения (70) сразу видно, что в пределе $\hbar \rightarrow 0$ лидирующий вклад в амплитуду перехода происходит от экстремального действия, которое решает уравнение Гамильтона-Якоби. Так и должно быть в квазиклассическом приближении. В частности детерминант в знаменателе в (70) дает первую квантовую поправку (поправка в разложении по \hbar) к чисто классическому вкладу. Классический вклад в решение уравнения Шредингера обсуждался на самой первой лекции этого курса еще в прошлом семестре. А квантовая поправка была вычислена в стационарном случае на лекции про квазиклассическое приближение.

Более того, сразу видно, что в ситуации, когда потенциал $V(z)$ является полиномом степени не выше, чем 2, квазиклассический ответ просто совпадает с точным, так как в (69) нет более высоких степеней по \vec{q} , чем 2 и (70) дает не приближенный, а точный ответ.

Заметим лишь, что в отличие от предыдущего семестра, здесь мы применяем квазиклассическое приближение в нестационарной задаче. Поэтому в экспоненте в (70) мы получаем полное действие, а не его укороченную часть $\int p(x) dx$. Причем работаем мы фактически в

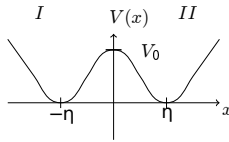


Рис. 7:

произвольной размерности, а не в одном измерении, как в квазиклассическом приближении в прошлом семестре.

2. Применим теперь полученные знания к конкретной задаче. Рассмотрим сначала ее стандартное решение приведенное в третьем томе курса Ландау и Лифшица.

Пусть мы имеем одномерное движение кванта в потенциале вида

$$V(x) = \frac{\lambda}{4} (x^2 - \eta^2)^2, \quad (71)$$

где λ и η — это какие-то размерные действительные константы. См. рис. 7, на котором изображен график потенциала.

При энергии $0 < E < V_0 \equiv \lambda \eta^4/4$, квант находящийся в одной из ям, I или II, может туннелировать в другую яму. В квазиклассическом пределе, как мы знаем, вероятность туннелирования очень мала.

Если бы туннелирование вообще отсутствовало, то квант мог бы находиться при $0 < E < V_0$ только в одной из ям. Основное состояние отвечало бы какой-то энергии E_0 и описывалось бы волновой функцией $\psi_0(x)$ в яме II и $\psi_0(-x)$ — в яме I. Эти величины в обсуждаемом приближении с хорошей точностью описывают основное состояние линейного осциллятора в каждой из ям. То есть $E_0 \approx \hbar \omega/2$, где ω_0 — частота приближенных линейных колебаний в любой из ям, а $\psi_0(x)$ волновая функция основного состояния осциллятора с центром в $x = \eta$. Заметим, что в обсуждаемом нами приближении барьер очень высок $V_0 \gg E_0$.

Однако, с учетом эффекта туннелирования между ямами, вместо одного уровня E_0 , в каждой из ям возникает два уровня E_1 и E_2 , расщепление между которыми мы и хотим найти.

В приближении, в котором мы работаем, с учетом слабого туннелирования между ямами, правильные волновые функции имеют вид:

$$\psi_1(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)], \quad \psi_2(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) - \psi_0(-x)], \quad (72)$$

так как гамильтониан инвариантен относительно отражения координат $x \rightarrow -x$. То есть в нулевом приближении уровень E_0 дважды вырожден. Сейчас мы увидим, что при учете эффектов туннелирования вырождение снимается.

Здесь ситуация очень похожа на ту, что встречалась нам в прошлом семестре с двумя дельта-ямами. В частности в яме I функция $\psi_0(x)$ исчезающе мала по сравнению с $\psi_0(-x)$. В яме II — ситуация обратная. Поэтому произведение $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ исчезающе мало везде и волновые функции (72) нормированы так, что их квадраты проинтегрированные в области каждой из ям по отдельности приблизительно равны единице.

Стационарные уравнения Шредингера в двух ситуациях (в нулевом приближении и с учетом поправок к энергии за счет туннелирования) приближенно имеют вид:

$$\psi_0'' + \frac{2m}{\hbar} [E_0 - V(x)] \psi_0 \approx 0, \quad \psi_{1,2}'' + \frac{2m}{\hbar} [E_{1,2} - V(x)] \psi_{1,2} \approx 0. \quad (73)$$

Умножим теперь первое уравнение на ψ_1 , а второе (для ψ_1) — на ψ_0 ; затем вычтем одно соотношение из другого и проинтегрируем по $x \in [0, +\infty)$. Имея ввиду, что $\psi_1(0) \approx \sqrt{2}\psi_0(0)$, $\psi_1'(0) \approx 0$ и

$$\int_0^{+\infty} dx \psi_0(x) \psi_1(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{+\infty} dx \psi_0^2(x) \approx \frac{1}{\sqrt{2}},$$

получаем, что

$$E_1 - E_0 \approx -\frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0).$$

Действуя аналогично, можно получить, что $E_2 - E_0$ равно тому же выражению, но с противоположным знаком. Поэтому:

$$\Delta E \equiv E_2 - E_1 \approx \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0). \quad (74)$$

Заметим, что $x = 0$ находится под барьером и поэтому полученное расщепление очень мало. Из квазиклассики мы знаем, что

$$\psi_0(0) \approx \sqrt{\frac{\omega_0}{2\pi v_0}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx},$$

где $|p(x)| = \sqrt{2m[V(x) - E_0]}$ и

$$v_0 = \sqrt{\frac{2(V_0 - E_0)}{m}},$$

a является точкой поворота $E_0 = V(a)$. Напомним также, что ω_0 — частота приближенных линейных колебаний в любой из ям, $E_0 \approx \hbar\omega_0/2$. Тогда

$$\psi'_0(0) \approx \frac{m v_0}{\hbar} \psi_0(0),$$

В результате из (74) мы получаем следующее выражение

$$\Delta E \approx \frac{\hbar\omega_0}{\pi} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p| dx} \ll \frac{\hbar\omega_0}{2} \approx E_0, \quad (75)$$

для расщепления основного уровня энергии в каждой из ям.

3. Теперь разберемся, как искать спектр энергий с использованием ядра оператора эволюции. Найдем, например, основной уровень энергии линейного одномерного осциллятора из соответствующего выражения для ядра оператора эволюции:

$$K_\omega(t|x, y) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \sin(\omega t)}} e^{\frac{i m \omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x^2 + y^2) \cos(\omega t) - 2xy]},$$

которое мы вывели на прошлой лекции. Как мы знаем, после поворота Вика $t \rightarrow -it$, это ядро приобретает вид:

$$\bar{K}_\omega(t|x, y) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar \operatorname{sh}(\omega t)}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar \operatorname{sh}(\omega t)} [(x^2 + y^2) \operatorname{ch}(\omega t) - 2xy]}.$$

В пределе $t \rightarrow \infty$ и в совпадающих точках это соотношение переходит в

$$\bar{K}_\omega(t|0, 0) \Big|_{t \rightarrow \infty} \approx \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\omega t}{2}}. \quad (76)$$

Чтобы извлечь выражение для энергии основного состояния из этого соотношения, вспомним определение ядра оператора эволюции и во что оно переходит при повороте Вика:

$$\bar{K}_\omega(t|x, y) = \langle x | e^{-\frac{\hat{H}t}{\hbar}} | y \rangle.$$

Вставим на правой стороне этого соотношения условие полноты

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{1}$$

для уровней энергии осциллятора $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, и сделаем очевидные преобразования:

$$\langle x | e^{-\frac{\hat{H}t}{\hbar}} | y \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x | e^{-\frac{\hat{H}t}{\hbar}} | n \rangle \langle n | y \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n t}{\hbar}} \psi_n^*(x) \psi_n(y),$$

где $\psi_n(x)$ — волновые функции осциллятора отвечающие E_n . Из последнего выражения в пределе $t \rightarrow \infty$ получаем, что

$$\bar{K}_\omega(t|0, 0) \Big|_{t \rightarrow \infty} \approx |\psi_0(0)|^2 e^{-\frac{E_0 t}{\hbar}} + |\psi_1(0)|^2 e^{-\frac{E_1 t}{\hbar}} + \dots,$$

где мы оставили два первых вклада, которые лидируют в рассматриваемом пределе. Сравнивая это выражение с (76), находим, что $E_0 = \hbar\omega/2$. Также видно, что

$$|\psi_0(0)|^2 = \left(\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Нахождение первого возбужденного уровня энергии осциллятора мы оставляем в качестве задачи. Приобретенные знания также позволяют понять почему квазиклассическое приближение дает точный ответ для уровней энергии линейного осциллятора. Оставляем это наблюдение в качестве домашнего упражнения.

4. Итак, чтобы вывести расщепление уровней (75) из одномерного функционального интеграла (68) с потенциалом (71), надо сделать в (68) поворот Вика и вычислить интеграл в квазиклассическом приближении в пределе $t \rightarrow \infty$. Фактически мы можем воспользоваться соотношением (70), сделать в нем преобразование $t \rightarrow -it$ и взять предел $t \rightarrow \infty$. Остается только найти все $z_{cl}^{(a)}$, дающие вклад, и вычислить детерминанты в знаменателе.

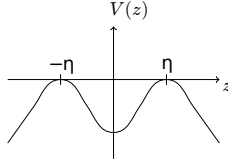


Рис. 8:

Вычисление, которое мы собираемся проделать, покажется достаточно длинным по сравнению с тем, что было проделано в разделе 2. Однако, оно представляет собой простейший вариант типичного вычисления в различных моделях квантовой теории поля и статистической физики. Оказывается, что вклады подобные тем, что мы обсудим ниже, играют очень важную роль в теории критических явлений и теории фазовых переходов второго рода.

Приступим к вычислению одномерного варианта функционального интеграла (68) с потенциалом (71) после поворота Вика:

$$\bar{K}(t|x, y) = \int_{z(-t/2)=y, z(t/2)=x} \mathcal{D}z(\tau) \times \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_{-t/2}^{t/2} d\tau \left[\frac{m \dot{z}^2}{2} + \frac{\lambda}{4} (z^2 - \eta^2)^2 \right] \right\}. \quad (77)$$

Заметим, что после замены $\tau \rightarrow -i\tau$ поменялся относительный знак между кинетическим и потенциальным вкладом в действие. Теперь для поиска экстремальной кривой $z_{cl}(\tau)$ нам необходимо решать уравнение движения вида:

$$m \ddot{z}_{cl} = V'(z_{cl}), \quad (78)$$

которое является аналогом динамического уравнения движения в обычном (лоренцевом) времени с перевернутым потенциалом, см. рис. 8. В такой постановке задачи мы имеем дело не с тунелированием, а рассматриваем классически разрешенное движение с одной горки потенциала, изображенного на рис. 8, на другую.

Заметим, что теперь поворот Вика приобретает еще одно важное значение. А именно, для нахождения расщепления (75) нам надо

было решать уравнение Шредингера в классически запрещенной зоне. То есть видно, что в классически запрещенной зоне удобнее работать в евклидовом (мнимом) времени, а не в реальном (лоренцевом или минковском).

Обсудим теперь какие $z_{cl}(\tau)$ дают вклад в функциональный интеграл (77). Простейшее решение уравнения (78) — это константы $\pm\eta$ — экстремумы потенциала: в таком случае мы по отдельности имеем $\ddot{z}_{cl} = 0$ и $V'(z_{cl}) = 0$. Тогда вместо (69) после поворота Вика в рассматриваемом одномерном случае для потенциала (71), мы имеем:

$$S[z(\cdot)] \approx S[z_{cl}(\cdot)] + \int_{-t/2}^{t/2} d\tau \left[\frac{m \dot{q}^2}{2} + \frac{1}{2} \lambda \eta^2 q^2 \right],$$

что в обычном (лоренцевом) времени описывает гармонические колебания с частотой $\omega_0 = \eta \sqrt{2\lambda/m}$; заметим, что для данного решения $S[z_{cl}(\cdot)] = 0$. Мы здесь отбросили более высокие степени по q по причине, которая объяснялась в самом начале лекции. На прошлой лекции мы уже научились брать оставшийся гауссов функциональный интеграл:

$$\bar{K}_0(t|\eta, \eta) \approx \frac{1}{\sqrt{\det \left\{ \frac{m}{2\pi\hbar} \left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right] \right\}_{[-t/2, t/2]}}} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\pi\hbar \operatorname{sh}(\omega_0 t)}}.$$

Такой же ответ мы получим и для $\bar{K}_0(t|\eta, -\eta)$. Здесь индекс 0 означает, что мы учли вклад только от одного $z_{cl} = \eta$ из всей суммы на правой стороне в (70).

Из найденного выражения, в свете обсуждения выше на этой лекции (в разделе 3), следует, что:

$$\bar{K}_0(t|\eta, \eta) \Big|_{t \rightarrow \infty} \sim e^{-\frac{\omega_0 t}{2}}, \quad (79)$$

то есть в лидирующем порядке имеется один уровень с энергией $E_0 \approx \frac{\hbar\omega_0}{2}$, как и было найдено в разделе 2 этой лекции.

Однако мы пока не учли других $z_{cl}(\tau)$, которые тоже дают вклад в функциональный интеграл в обсуждаемом приближении. Чтобы найти их, помножим уравнение (78) на \dot{z}_{cl} :

$$0 = \dot{z}_{cl} [m \ddot{z}_{cl} - V'(z_{cl})] \equiv \frac{d}{d\tau} \left[\frac{m \dot{z}_{cl}^2}{2} - V(z_{cl}) \right],$$

и получим, что имеется сохраняющаяся величина, которую можно назвать евклидовой энергией:

$$0 \leq E = \frac{m \dot{z}_{cl}^2}{2} - V(z_{cl}), \quad (80)$$

в выражении для которой просто перевернули потенциал от того, что изображен на рис. 7 к тому, который нарисован на рис. 8. Это, очевидно, произошло в результате поворота Вика.

В таком случае из (80) следует, что:

$$\dot{z}_{cl} = \sqrt{\frac{2[E + V(z_{cl})]}{m}}$$

и соответствующее экстремальное действие равно:

$$\begin{aligned} S[z_{cl}(\cdot)] &= \int_{-t/2}^{t/2} d\tau \left[\frac{m \dot{z}_{cl}^2}{2} + V(z_{cl}) \right] = m \int_{-t/2}^{t/2} d\tau \dot{z}_{cl}^2 - E t = \\ &= \int_{z_{cl}(-t/2)}^{z_{cl}(t/2)} dz_{cl} m \dot{z}_{cl} - E t \equiv \int_{-a}^a dx |p(x)| - E t, \quad (81) \end{aligned}$$

где $\pm a = z_{cl}(\pm t/2)$ — точки поворота в задаче в лоренцевом времени. В евклидовом же времени — это точки начала спуска и его конца при переходе с одного бугра на другой на рис. 8. Обратим внимание, что мы здесь получили почти то, что стоит в экспоненте в выражении (75).

Вспомним теперь, что, в свете обсуждения в разделе 3 этой лекции, нас интересует предел $t \rightarrow \infty$. Сейчас мы увидим, что задача на нахождение z_{cl} и соответствующего действия в этом пределе сильно упрощается. А именно, в таком случае имеется решение, которое ведет себя следующим образом:

$$z_{cl} \left(\pm \frac{t}{2} \right) \Big|_{t \rightarrow \infty} = \pm \eta, \quad a = \eta,$$

и отвечает $E = 0$. В этой ситуации мы можем решить уравнение движения,

$$\frac{m \dot{z}_{cl}^2}{2} = V(z_{cl}), \quad d\tau = \pm \sqrt{\frac{2m}{\lambda}} \frac{dz_{cl}}{z_{cl}^2 - \eta^2},$$

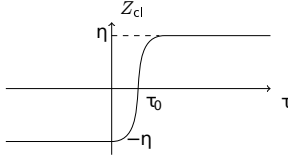


Рис. 9:

точно, и найти, что

$$z_{cl}(\tau) = \eta \operatorname{th} \left[\frac{\omega_0 (\tau - \tau_0)}{\sqrt{2}} \right]. \quad (82)$$

Такое $z_{cl}(\tau)$ описывает вечно продолжающееся, от $\tau = -\infty$ к $\tau = +\infty$, перекачивание с вершины левого на вершину правого бугра потенциала с рис. 8. График решения (82) изображен на рис. 9. Здесь τ_0 константа интегрирования — параметр решения, который определяет момент прохождения через центр потенциала.

Такое z_{cl} называется инстантоном и в реальном (лоренцевом времени) приближенно описывает туннелирование из одной ямы в другую. Мы здесь говорим “приближенно описывает”, потому что данное решение задает туннелирование между двумя экстремальными значениями точек поворота, $a \rightarrow \eta$, которое отвечает переходу со дна одной ямы на дно другой. Ведь мы рассматриваем предел $t \rightarrow \infty$ в евклидовом времени и $E = 0$. Однако напомним, что в приближении, в котором мы работаем, основной уровень энергии лежит очень низко, то есть $E_0 \ll V_0$.

Для решения (82)

$$S_{cl} \equiv S[z_{cl}(\cdot)] = \int_{-\eta}^{\eta} dx \sqrt{2mV(x)}, \quad (83)$$

что совпадает с (81) только когда $E = 0$ и в пределе $t \rightarrow \infty$. При этом (83) совпадает с выражением в экспоненте в (75), если $a \rightarrow \eta$.

Учет такого z_{cl} как (82) очевидно необходим при определении амплитуды перехода из $y = -\eta$ в $x = \eta$:

$$\bar{K}_1(t | -\eta, \eta) \approx \frac{\mathcal{N} e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}}}{\sqrt{\det[-\hat{A}]}}$$

где индекс 1 означает, что мы учли вклад одного инстантона. Теперь остается вычислить одномерный вариант детерминанта оператора (70) для обсуждаемого z_{cl} :

$$\hat{A} = \frac{1}{2\pi\hbar} \left[-m \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(z_{cl}) \right], \quad V''(z_{cl}) = -\lambda\eta^2 + 3\lambda z_{cl}^2, \quad (84)$$

Для вычисления этого детерминанта нам надо найти моды и собственные числа \hat{A} , то есть решить уравнение:

$$m \ddot{f}_n + \lambda\eta^2 f_n - 3\lambda z_{cl}^2 f_n = -w_n^2 f_n, \quad (85)$$

которое, как нетрудно видеть, следует из линеаризации уравнения на z_{cl} :

$$m \ddot{z}_{cl} + \lambda\eta^2 z_{cl} - \lambda z_{cl}^3 = 0, \quad (86)$$

где $-w_n^2 \equiv \lambda_n$ — это лишь удобное для дальнейшего обозначение собственных чисел оператора \hat{A} : тогда $\sqrt{\det(-\hat{A})} = \prod_{n=0}^{\infty} w_n$.

Однако, можно увидеть, что у уравнения (85) есть решения с $w_0 = 0$. Действительно, если продифференцировать (86) по τ , то мы получим ровно уравнение (85) на $f_0 = \dot{z}_{cl}$ с $w_0 = 0$.

Наличие $w_0 = 0$ — это новая ситуация, с которой мы пока не сталкивались. Ведь тогда наивно $\det(-\hat{A}) = 0$, а $1/\sqrt{\det(-\hat{A})}$ расходится. Какой смысл этой расходимости?

Чтобы получить ответ на этот вопрос, рассмотрим собственную функцию $f_0 \equiv \dot{z}_{cl}$, отвечающую $w_0 = 0$, которая называется нулевой модой. Физический смысл ее существования связан с наличием параметра τ_0 в решении (82). Действительно, изменение решения (82) при вариации τ_0 выглядит как $\delta z_{cl} = \dot{z}_{cl} \delta\tau_0$. В некотором смысле мы имеем ситуацию, в которой на правой стороне соотношения

$$z(\tau) = z_{cl}(\tau) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n f_n(\tau),$$

содержится $a_0 = \delta\tau_0$ и $f_0(\tau) = \dot{z}_{cl}$. Только такой вклад происходит от z_{cl} , а не от разложения по модам. Действительно, рассмотрим норму (метрику) в пространстве функций:

$$\int_{-t/2}^{t/2} d\tau |\delta z|^2 = \int_{-t/2}^{t/2} d\tau |\delta z_{cl} + \delta q|^2 = \delta\tau_0^2 \int_{-t/2}^{t/2} d\tau |\dot{z}_{cl}|^2 + \int_{-t/2}^{t/2} d\tau |\delta q|^2.$$

В отличие от ситуации на предыдущей лекции, теперь δz_{cl} не равно нулю, так как в z_{cl} имеется произвольный параметр τ_0 . Полученная норма приводит к тому, что мера интегрирования в функциональном интеграле имеет вид:

$$\mathcal{D}z(\tau) = \sqrt{\int_{-t/2}^{t/2} d\tau |\dot{z}_{cl}|^2} d\tau_0 \prod_{n=1}^{\infty} da_n.$$

В результате:

$$\frac{1}{\sqrt{\det(-\hat{A})}} = \text{const} \int_{-t/2}^{+t/2} d\tau_0 \prod_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} da_n e^{-w_n^2 a_n^2},$$

где константа, в частности содержит и множитель $\sqrt{\int_{-t/2}^{t/2} d\tau |\dot{z}_{cl}|^2}$. Здесь подинтегральное выражение не зависит от τ_0 . Поэтому интеграл по τ_0 расходится в пределе $t \rightarrow \infty$. та расходимость как раз и возникает из нулевой моды оператора \hat{A} .

Соберем теперь вместе все сделанные наблюдения. Если нас интересует амплитуда перехода из $y = -\eta$ в $x = \eta$, то, с учетом одного инстантонного перехода, мы получаем:

$$\bar{K}_1(t | -\eta, \eta) \Big|_{t \rightarrow \infty} \approx \int_{-t/2}^{+t/2} d\tau_0 \frac{\mathcal{N}' e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}}}{\prod_{n=1}^{\infty} w_n} \Big|_{t \rightarrow \infty}, \quad (87)$$

где S_{cl} определен в (83) и все несущественные постоянные множители мы собрали в \mathcal{N}' . Мы здесь действуем не очень строго для упрощения изложения. Нас интересуют лишь оценки ответа. Поэтому мы и следим лишь за характерными функциональными вкладами.

Вычисление $\prod_{n=1}^{\infty} w_n$ (без нулевой моды) для оператора (84) дает тот же ответ, что мы получили на прошлой лекции

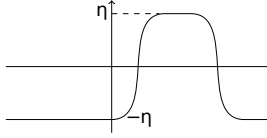


Рис. 10:

$$\frac{\det' \left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + w(\tau) \right]_{[-t/2, t/2]}}{\psi_0(t)} = \text{const},$$

где теперь $w(\tau) = V''[z_{cl}(\tau)]$ и штрих у \det означает, что он вычисляется без учета нулевой моды. Можно оценить, что, как и в случае для $z_{cl} = \pm\eta$, в пределе $t \rightarrow \infty$ важный для дальнейшего обсуждения вклад имеет вид:

$$\frac{1}{\prod_{n=1}^{\infty} w_n} \Big|_{t \rightarrow \infty} = \frac{\text{const}}{\sqrt{\psi_0(t)}} \Big|_{t \rightarrow \infty} = \text{const} e^{-\frac{\omega_0 t}{2}}.$$

Мы не будем проделывать этой оценки здесь, чтобы не усложнять изложение. Читателю придется поверить нам или же оценить данное выражение самостоятельно⁹.

Таким образом:

$$\bar{K}_1(t | -\eta, \eta) \Big|_{t \rightarrow \infty} \approx \text{const} \int_{-t/2}^{+t/2} d\tau_0 e^{-\frac{\omega_0 t}{2}} e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}} \Big|_{t \rightarrow \infty}.$$

Теперь заметим, что в квазиклассическом пределе величина $e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}}$ очень мала. Однако она умножается на величину $\int_{-t/2}^{+t/2} d\tau_0 = t$, которая в пределе $t \rightarrow \infty$ очень велика. Поэтому (87) может быть того же порядка, что и (79).

⁹Однако, заметим, что функция (82) практически постоянна везде и равна либо η , либо же $-\eta$, за исключением короткого (по сравнению с $t \rightarrow \infty$) промежутка времени $\Delta\tau \sim 1/\omega$ вокруг τ_0 , где происходит перескок из одной ямы в другую. Поэтому вычисление детерминанта в данной ситуации не сильно отличается от случая $z_{cl} = \pm\eta$, где мы уже знаем ответ. Учет вклада короткого промежутка времени дает вклад только в предэкспоненту. Оказывается, что при учете только лидирующего вклада в пределе $t \rightarrow \infty$ такая оценка работает.

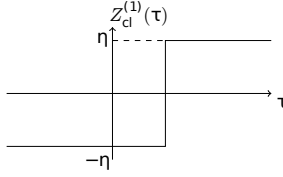


Рис. 11:

Это значит, что при вычислении полного ответа для амплитуды возвращения $\bar{K}(t|\eta, \eta) \Big|_{t \rightarrow \infty}$ нужно помимо (79) также, по крайней мере, учитывать туннелирование из η в $-\eta$ и обратно. Но и это еще не все, ведь квант может делать несколько туннелирований туда и обратно. Поэтому имеет смысл осуждать $\bar{K}(t|\eta, \eta) \Big|_{t \rightarrow \infty}$ при учете таких многократных перескоков.

Проблема в том, что перескок туда и обратно — такого вида, как изображен на рис. 10 является лишь приближенным решением уравнения (78). Однако в приближении маленькой вероятности туннелирования (перескока), функция z_{cl} из (82) меняется существенно только в очень узкой области размера $\Delta\tau \sim 1/\omega_0$. Остальное время из промежутка $[-t/2, t/2]$, $t \rightarrow \infty$ она остается практически постоянной. Это означает, что в нашем приближении выражение (82) можно заменить на:

$$z_{cl}^{(1)}(\tau) \approx \eta \operatorname{sign}(\tau - \tau_0),$$

где $\operatorname{sign}(x) = 1$, если $x > 0$ и $\operatorname{sign}(x) = -1$, если $x < 0$. График такой функции изображен на рис. 11.

Продолжая эту логическую цепочку можно понять, что обратный перескок дается функцией:

$$-z_{cl}^{(1)}(\tau) \approx -\eta \operatorname{sign}(\tau - \tau_0),$$

а перескок туда и обратно отвечает функции:

$$z_{cl}^{(2)}(\tau) \approx \eta \prod_{a=1}^2 \operatorname{sign}(\tau - \tau_a), \quad \tau_1 \ll \tau_2.$$

В случае нескольких перескоков, которые удалены друг от друга $\tau_{a+1} - \tau_a \gg 1/\omega_0$, $a = \overline{1, N}$ мы получим:

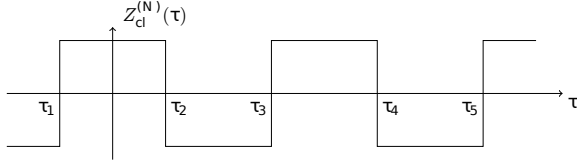


Рис. 12:

$$z_{cl}^{(N)}(\tau) \approx \eta \prod_{a=1}^N \text{sign}(\tau - \tau_a), \quad \tau_1 \ll \tau_2 \ll \dots \ll \tau_N$$

График этой функции изображен на рис. 12.

Приведенные аргументы позволяют сделать вывод о том, что действие для перескока туда и обратно имеет вид

$$S_{cl}^{(2)} = 2 S_{cl} + \mathcal{O}\left(e^{-\omega_0(\tau_2 - \tau_1)}\right) \approx 2 S_{cl},$$

где S_{cl} определено в (83). Это приближенное равенство верно, так как весь вклад в действие набирается от области, где z_{cl} меняется с изменением τ , ведь иначе $z_{cl}(\tau) \approx \pm\eta$ и мы имеем $m\dot{z}_{cl}^2/2 \approx 0$ и $V(z_{cl}) \approx 0$. Соответственно, аналогично можно получить, что $S_{cl}^{(N)} \approx N S_{cl}$.

Далее, у N инстантонного решения имеются свободные параметры τ_1, \dots, τ_N . Из меры $\mathcal{D}z(\tau)$ возникают интегралы по ним, аналогично тому, как возникал интеграл по τ_0 для одного инстантона выше. Только эти интегралы ограничены по порядку $\tau_1 \ll \tau_2 \ll \dots \ll \tau_N$, ведь инстантонное решение упорядоченное. Также можно показать, что вклады от N инстантонных решений, которые возникают от близких значений соседних параметров τ_{j+1} и τ_j не растут с $t \rightarrow \infty$, а поэтому они подавлены по сравнению с теми вкладками, что мы учитываем.

Таким образом, собирая все эти наблюдения вместе, мы находим, что

$$\begin{aligned} & \bar{K}_\infty(t|\eta, \eta) \Big|_{t \rightarrow \infty} \approx \\ & \approx \text{const } e^{-\frac{\omega_0 t}{2}} \sum_{N=0}^{\infty} (\kappa \omega_0)^{2N} e^{-2N \frac{S_{cl}}{\hbar}} \int_{-t/2}^{t/2} d\tau_1 \int_{-t/2}^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_{-t/2}^{\tau_{2N-1}} d\tau_{2N} \approx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\approx \text{const } e^{-\frac{\omega_0 t}{2}} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{\left(\kappa \omega_0 t e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}}\right)^{2N}}{(2N)!} \approx \\ &\approx \text{const } e^{-\frac{\omega_0 t}{2}} \left[\exp \left\{ \kappa \omega_0 t e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}} \right\} - \exp \left\{ -\kappa \omega_0 t e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}} \right\} \right], \end{aligned}$$

где мы учли только четные, $2N$, вклады, так как обсуждаем перескоки с возвращением в $x = \eta$, безразмерная константа κ (порядка единицы) содержит все маловажные множители, которые возникают из \mathcal{N}' и других вкладов, множитель ω_0 при κ восстановлен из размерностных соображений. В принципе κ можно оценить, но чтобы не сильно усложнять наше изложение, мы этого не делаем.

Из полученного соотношения, используя аргументацию секции 3, видно, что расщепление уровней определяется как:

$$\Delta E \approx 2 \kappa \hbar \omega_0 e^{-\frac{S_{cl}}{\hbar}},$$

что совпадает с (75) с точностью до константы.

IV. Лекция. *Нерелятивистский предел для уравнения Шредингера–Фока–Клейна–Гордона во внешних электромагнитных полях, калибровочная ковариантность уравнений квантовой механики, ковариантная производная, нерелятивистское уравнение во внешних электромагнитных полях для частиц со спином ноль, проблемы с вероятностной интерпретацией решения уравнения ШФКГ, уравнение Дирака, γ -матрицы, ковариантность уравнения Дирака относительно преобразований координат, грассманова алгебра фермионного осциллятора.*

1. Нашей задачей теперь является определение уравнения, описывающего взаимодействие электронов с электромагнитными полями. Как мы знаем из курса теории поля, последовательный учет взаимодействия частиц с электромагнитными полями требует рассмотрения релятивистских эффектов. Поэтому мы введем релятивистские уравнения, описывающие обсуждаемые явления. Нерелятивистский же предел будет обсуждаться на одной из последующих лекций. Он необходим для описания поведения электронов и атомов во внешних полях.

Заметим, что мы действуем не от эмпирических наблюдений, как это делается в общей физике, а исходя из фундаментальных принципов. Это просто два дополняющих друг друга подхода. В теоретической физике важно понимание фундаментальных общих принципов описания явлений природы.

Мы уже знаем одно релятивистское уравнение, которое вроде описывает поведение квантов с отличной от нуля массой. Оно вводилось на самой первой лекции прошлого семестра. Чтобы вспомнить его, сформулируем еще один альтернативный взгляд на происхождение этого уравнения.

Как мы знаем, при квантовании обычные классические наблюдаемые заменяются эрмитовыми дифференциальными операторами. Например, в x -представлении:

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\partial}, \quad E \rightarrow i\hbar\partial_t. \quad (88)$$

Действительно при такой замене обычное классическое уравнение:

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \quad (89)$$

переходит в дифференциальное уравнение Шредингера на волновую функцию:

$$i \hbar \partial_t \Psi(\vec{x}, t) = \left[\frac{(-i \hbar \vec{\partial})^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] \Psi(\vec{x}, t). \quad (90)$$

Аналогично, используя мнемоническое правило (88), обычное релятивистское соотношение

$$\frac{E^2}{c^2} - \vec{p}^2 = m^2 c^2 \quad (91)$$

можно обратиться в дифференциальное уравнение Шредингера-Фока-Клейна-Гордона (ШФКГ):

$$\left[\frac{(i \hbar \partial_t)^2}{c^2} - (-i \hbar \vec{\partial})^2 \right] \Phi(\vec{x}, t) = (m c)^2 \Phi(\vec{x}, t),$$

которое представляется в следующем явно лоренц-ковариантном виде:

$$\left[\hbar^2 \square + (m c)^2 \right] \Phi(\underline{x}) = 0, \quad (92)$$

где

$$\square = \partial_\mu \partial^\mu = \frac{\partial_t^2}{c^2} - \Delta, \quad \mu = \overline{0, 3},$$

— оператор д'Аламбера, а $\underline{x} = x^\mu = (ct, \vec{x})$ — 4-вектор координаты.

2. На самой первой лекции из прошлого семестра мы видели, как в нерелятивистском пределе из уравнения ШФКГ (92) следовало свободное (с $V = 0$) нестационарное уравнение Шредингера (90). Вспомним, детали этого вывода. Они нам пригодятся на одной из следующих лекций.

Запишем (92) в виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2 \partial_t^2}{c^2} + \hbar^2 \Delta \right] \Phi(\underline{x}) = m^2 c^2 \Phi(\underline{x}), \quad (93)$$

и будем искать его решение в форме

$$\Phi(\underline{x}) = e^{-i\frac{mc^2t}{\hbar}} \Psi(\vec{x}, t),$$

где положим, что $\Psi(\vec{x}, t)$ медленная функция от времени по сравнению с экспоненциальным множителем в последнем выражении. Это и отвечает нерелятивистскому приближению. Учитывая соотношение

$$\partial_t \Phi = -i \frac{mc^2}{\hbar} e^{-i\frac{mc^2t}{\hbar}} \Psi + e^{-i\frac{mc^2t}{\hbar}} \partial_t \Psi,$$

получим, что

$$\hbar^2 \partial_t^2 \Phi = \left[-mc^2 \Psi - 2i\hbar mc^2 \partial_t \Psi + \hbar^2 \partial_t^2 \Psi \right] e^{-i\frac{mc^2t}{\hbar}}. \quad (94)$$

Как мы пояснили, в нерелятивистском пределе верно неравенство

$$\hbar |\partial_t \Psi| \ll mc^2 |\Psi|.$$

Поэтому в (94) можно пренебречь $\hbar^2 \partial_t^2 \Psi$. Тогда подставляя (94) в (93), мы как раз и получаем на Ψ уравнение Шредингера (90) с $V = 0$.

3. Уравнение ШФКГ можно обобщить на случай присутствия внешних электромагнитных полей. Для этого вспомним из курса теории поля, что связь между энергией и импульсом частицы при наличии таких полей задается соотношением:

$$\frac{(E - eA_0)^2}{c^2} - \left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 = (mc)^2,$$

где $A_0 = \varphi$ — электрический потенциал, а E/c и \vec{P} — это компоненты обобщенного 4-импульса.

Опять же используя мнемоническое правило (88) для компонент обобщенного 4-импульса, мы получаем дифференциальное уравнение вида:

$$\left[-\frac{(\hbar \partial_t + ieA_0)^2}{c^2} + \left(\hbar \vec{\partial} - i \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - (mc)^2 \right] \Phi(\vec{x}, t) = 0,$$

которое можно переписать в явно лоренц-ковариантном виде:

$$\left[\left(\hbar \partial_\mu + i \frac{e}{c} A_\mu \right) \left(\hbar \partial^\mu + i \frac{e}{c} A^\mu \right) + (mc)^2 \right] \Phi(\underline{x}) = 0, \quad (95)$$

где $A^\mu = (A_0, \vec{A})$ и $A_\mu = (A_0, -\vec{A})$. Обычно вводят так называемую длинную или ковариантную производную:

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu,$$

коммутатор которой определяет тензор напряженности электромагнитного поля:

$$[D_\mu, D_\nu] \equiv D_\mu D_\nu - D_\nu D_\mu = \frac{ie}{\hbar c} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) \equiv \frac{ie}{\hbar c} F_{\mu\nu}.$$

Из курса теории поля мы знаем, что калибровочная ковариантность уравнений движения (относительно замен $A_\mu \rightarrow A_\mu - \partial_\mu \alpha$) играет очень важную роль. Действительно, ведь динамика частиц и полей зависит от \vec{E} и \vec{B} , которые являются компонентами калибровочно инвариантного тензора $F_{\mu\nu}$, а не от вектор-потенциала A_μ .

Калибровочная ковариантность уравнения (95) не очевидна. Для этого необходимо, чтобы при преобразованиях

$$\bar{A}_\mu = A_\mu - \partial_\mu \alpha, \tag{96}$$

также менялась и волновая функция $\Phi(x)$. Чтобы понять как она это должна делать, заметим, что:

$$\begin{aligned} e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha} D_\mu e^{-\frac{ie}{\hbar c} \alpha} &\equiv e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha} \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) e^{-\frac{ie}{\hbar c} \alpha} = \\ &= \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} (A_\mu - \partial_\mu \alpha) \equiv \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} \bar{A}_\mu \equiv \bar{D}_\mu. \end{aligned}$$

Аналогично,

$$e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha} D_\mu D^\mu e^{-\frac{ie}{\hbar c} \alpha} = e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha} D_\mu e^{-\frac{ie}{\hbar c} \alpha} e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha} D^\mu e^{-\frac{ie}{\hbar c} \alpha} = \bar{D}_\mu \bar{D}^\mu.$$

Поэтому, если потребовать, чтобы волновая функция преобразовывалась как¹⁰

$$\bar{\Phi} = e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha} \Phi, \tag{97}$$

¹⁰Вспомним, что фаза волновой функции не является физически измеримой величиной, а потому ее можно подкалибровывать.

то мы получаем, что уравнение (95) меняется следующим образом:

$$\begin{aligned} \left[\hbar^2 \bar{D}_\mu \bar{D}^\mu + (mc)^2 \right] \bar{\Phi} &= \left[\hbar^2 e^{\frac{i\epsilon}{\hbar c} \alpha} D_\mu D^\mu e^{-\frac{i\epsilon}{\hbar c} \alpha} + (mc)^2 \right] e^{\frac{i\epsilon}{\hbar c} \alpha} \Phi = \\ &= e^{\frac{i\epsilon}{\hbar c} \alpha} \left[\hbar^2 D_\mu D^\mu + (mc)^2 \right] \Phi = 0, \end{aligned}$$

то есть остается неизменным. Значит уравнение (95) ковариантно при калибровочных преобразованиях (96) и (97).

Далее, действуя таким же образом как в начале этой лекции, из (95) в нерелятивистском пределе мы получаем уравнение вида:

$$i \hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\partial} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \Psi + e A_0 \Psi, \quad (98)$$

которое квантует соотношение

$$E = \frac{\left(\vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2m} + V, \quad V = e\varphi \equiv e A_0,$$

тоже известное нам из курса теории поля. Уравнение (98) ковариантно относительно преобразований (96) и $\Psi' = e^{\frac{i\epsilon}{\hbar c} \alpha} \Psi$.

Вид калибровочного преобразования Ψ согласуется также с представлением решения уравнения Шредингера в виде интеграла по путям. Действительно, из курса теории поля мы знаем, что действие для нерелятивистской частицы во внешних электромагнитных полях имеет вид:

$$\begin{aligned} S[A^\mu, \vec{z}(\cdot)] &= \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} + \frac{e}{c} (\vec{A}, \dot{\vec{z}}) - e\varphi \right] \equiv \\ &\equiv \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} - \frac{e}{c} A_\mu \dot{z}^\mu \right], \end{aligned} \quad (99)$$

где $z^\mu(\tau) = (c\tau, \vec{z})$ и $A_\mu = (\varphi, -\vec{A})$. Тогда, как мы проверяли на курсе теории поля, при калибровочном преобразовании (96) данное действие сдвигается на величину, которая не зависит от траектории $\vec{z}(\tau)$:

$$S[\vec{A}^\mu, \vec{z}(\cdot)] = S[A^\mu, \vec{z}(\cdot)] + \frac{e}{c} [\alpha(t, \vec{x}) - \alpha(t_0, \vec{y})]. \quad (100)$$

Теперь, абсолютно точно также, как мы вывели интеграл по путям на первых двух лекциях этого семестра, можно показать, что в присутствии внешних электромагнитных полей ядро оператора эволюции будет иметь вид:

$$K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \int_{\vec{z}(t)=\vec{x}, \vec{z}(t_0)=\vec{y}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) e^{i \frac{S[A^\mu, \vec{z}(\cdot)]}{\hbar}}. \quad (101)$$

Тогда из (100) следует, что при калибровочных преобразованиях ядро оператора эволюции изменяется как:

$$\bar{K}(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) e^{\frac{i e}{\hbar c} [\alpha(t, \vec{x}) - \alpha(t_0, \vec{y})]}.$$

Такая форма преобразования приводит к тому, что соотношение

$$\Psi(\vec{x}, t) = \int d^3\vec{y} K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) \Psi(\vec{y}, t_0)$$

меняется ковариантным образом — то есть имеет тот же вид для преобразованных элементов. Это является дополнительным аргументом в пользу того, что мы верно определили калибровочное преобразование волновой функции.

4. Уравнение (98) почти то, что нам нужно для описания нерелятивистского электрона во внешних электромагнитных полях. “Почти” потому, что оно не учитывает наличия спина у электрона и его взаимодействия с внешним магнитным полем, которое мы постулировали для описания совокупности экспериментальных данных в прошлом семестре. Эта проблем связана с тем, что уравнение ШФКГ (95) описывает динамику скалярного поля (со спином ноль), а не спинорного.

Помимо этого у уравнения ШФКГ имеется еще и ряд других проблем, одну из которых можно увидеть из следующих соображений. Рассмотрим свободное (без внешних электромагнитных полей) уравнение (92) и умножим его на Φ^* , а затем вычтем из полученного соотношения комплексно сопряженное уравнение помноженное на Φ . Аналогично тому, как это следовало из нестационарного уравнения Шредингера, в этом случае мы тоже получим уравнение непрерывности:

$$\partial_t \rho = \text{div} \vec{j},$$

где

$$\rho = \frac{i \hbar}{2 m c^2} [\Phi^* \partial_t \Phi - \Phi \partial_t \Phi^*], \quad \vec{j} = -\frac{i \hbar}{2 m} [\Phi^* \vec{\partial} \Phi - \Phi \vec{\partial} \Phi^*].$$

По аналогии с нерелятивистским случаем казалось бы надо интерпретировать ρ как плотность вероятности. Однако тогда возникает проблема, что так определенная плотность может менять знак, что очевидно недопустимо.

Эта проблема связана с тем, что уравнение (92) содержит, в отличие от нестационарного уравнения Шредингера, вторую степень производной по времени. Наличие второй степени градиента по t , в свою очередь, необходимо для лоренц-ковариантности уравнения (92). Действительно, при преобразованиях Лоренца производные по времени перемешиваются с производными вдоль пространственных координат. В таком случае, для уважение лоренц-инвариантности необходимо чтобы степени $\vec{\partial}$ и ∂_t в уравнении совпадали.

Конкретно эта проблема с ρ для скалярной теории ШФКГ решается в рамках квантовой теории поля. Нас же сейчас интересует уравнение, которое, во-первых, учитывает наличие спина у электрона. А, во-вторых, решает проблему с вероятностной интерпретацией волновой функции еще в рамках квантовой механики. То есть, мы хотим сформулировать такое волновое уравнение, которое содержит первую степень ∂_t и, соответственно, $\vec{\partial}$. Оказывается, что обе эти проблемы (со спином и с ρ) решаются в рамках одного уравнения Дирака.

Для начала вспомним, что при наличии спина волновая функция Ψ является спинорным столбцом. Действуя как Дирак (путем проб и ошибок) предложим следующую форму уравнения:

$$i \hbar \gamma_\mu \partial^\mu \hat{\Psi}(\underline{x}) = m c \hat{\Psi}(\underline{x}), \quad (102)$$

где крышка над Ψ подчеркивает, что это спинорный столбец, а 4-вектор γ_μ введен, чтобы индекс у ∂^μ был с чем-то свернут — для лоренц-ковариантности.

Однако наивно симметрия Лоренца нарушена, так как вроде в уравнении (102) присутствует заданный 4-вектор $\gamma^\mu = (\gamma_0, \vec{\gamma})$. Ведь явное присутствие такого 4-вектора в уравнении вроде бы определяет выделенное направление в пространстве-времени и, соответственно, нарушает лоренц-инвариантность. Заметим, однако, что компоненты этого четыре-вектора должны быть матрицами, так как $\hat{\Psi}$

— столбец. Ниже мы обсудим как решается эта проблема с лоренц-ковариантностью. И решение будет основано на том факте, что γ_μ — это вектор из матриц, действующих в спинорном пространстве.

Сейчас же определим свойства матриц γ_μ из общих соображений. Заметим, что для релятивистского электрона энергия и импульс связаны соотношением $p_\mu p^\mu = m^2 c^2$. Это значит, что каждая компонента спинора $\hat{\Psi}(\underline{x})$, отвечающая свободному кванту, должна быть пропорциональна волне вида $e^{-i p_\mu x^\mu / \hbar}$, где $p_\mu p^\mu = m^2 c^2$. Такая волна решает уравнение (92). То есть из (102) должно как-то следовать (92).

Чтобы это увидеть, подействуем на обе стороны уравнения (102) слева оператором $i \hbar \gamma_\nu \partial^\nu$:

$$-\hbar^2 \gamma_\nu \partial^\nu \gamma_\mu \partial^\mu \hat{\Psi} = m c \cdot i \hbar \gamma_\nu \partial^\nu \hat{\Psi} = m c \cdot m c \hat{\Psi}.$$

На последнем шаге этой цепочки равенств мы снова использовали уравнение Дирака (102). Приравнивая самую левую и самую правую стороны последнего соотношения, получаем:

$$-\hbar^2 \frac{1}{2} \left(\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu \right) \partial^\mu \partial^\nu \hat{\Psi} = (m c)^2 \hat{\Psi}, \quad (103)$$

где на левой стороне мы учли, что $\partial^\mu \partial^\nu \hat{\Psi} = \partial^\nu \partial^\mu \hat{\Psi}$. Теперь, если потребовать, чтобы выполнялось условие:

$$\left\{ \gamma_\mu, \gamma_\nu \right\} \equiv \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2 \eta_{\mu\nu} \hat{\mathbf{1}}, \quad (104)$$

где $\eta_{\mu\nu}$ — метрический тензор Минковского, а $\hat{\mathbf{1}}$ является единичным оператором (матрицей) в спинорном пространстве, то из (103) мы получаем уравнение (92) для каждой из компонент спинора $\hat{\Psi}$.

Таким образом, в некотором смысле дифференциальный оператор в уравнении Дирака является квадратным корнем из дифференциального оператора в уравнении ШФКГ.

Операция $\{A, B\} \equiv AB + BA$ называется антикоммутатором матриц A и B , а (анти)коммутационные соотношения (104) для γ -матриц Дирака называется алгеброй Клиффорда.

5. Прежде чем преступить к изучению представлений алгебры Клиффорда и, соответственно, определению конкретного вида γ -матриц, обсудим более простой случай в трехмерном пространстве. Вспомним с прошлого семестра, что для σ -матриц Паули верно следующее уравнение:

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}} + i \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l, \quad j, k, l = \overline{1, 3},$$

из которого, помимо коммутационных соотношений алгебры $su(2)$,

$$[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i \epsilon_{jkl} \hat{s}_l, \quad \hat{s}_j \equiv \frac{\hat{\sigma}_j}{2},$$

также следуют антикоммутационные соотношения из алгебры Клиффорда:

$$\{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} = 2 \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}}, \quad (105)$$

но в трехмерном евклидовом пространстве, а не в трехмерном и тем более не в четырехмерном пространстве–времени Минковского, так как справа стоит метрический тензор δ_{jk} , $j = \overline{1, 3}$ в пространстве Евклида.

Этот пример позволит нам понять смысл и происхождение матриц Дирака. Действительно, рассмотрим уравнение вида:

$$(i \hbar \hat{\sigma}_j \partial_j - m c) \hat{\psi}(\vec{x}) = 0, \quad (106)$$

где $\hat{\psi}(\vec{x})$ — это двухкомпонентный спинор, который зависит только от трех пространственных координат \vec{x} .

Поступая с уравнением (106) также как мы это сделали выше при переходе от (102) к (103), то есть применяя к обеим его сторонам сопряженный дифференциальный оператор $i \hbar \hat{\sigma}_j \partial_j + m c$, мы получим уравнение:

$$[\hbar^2 \Delta + (m c)^2] \hat{\psi} = 0, \quad (107)$$

если воспользуемся трехмерной алгеброй Клиффорда (105).

Мы здесь сейчас не обсуждаем физический смысл уравнений (106) и (107). Нам лишь важно понять какая математическая структура стоит за этими уравнениями, что позволит открыть новую для нас математику, а за ней и новую физику, лежащую в основе уравнения Дирака в четырехмерном пространстве–времени.

А именно, очевидно, что уравнение (107) является ковариантным относительно трехмерных вращений. Ковариантно ли уравнение

(106)? Этот вопрос имеет прямое отношение к ковариантности исходного четырехмерного уравнения Дирака относительно преобразований Лоренца. Там ситуация аналогична, как мы увидим ниже¹¹.

Чтобы ответить на поставленный вопрос о ковариантности (106), вспомним, что в прошлом семестре мы сталкивались только с такой ситуацией, когда волновая функция факторизуется:

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \chi \cdot \psi(\vec{x}) \quad (108)$$

на спинорную, χ , и пространственную, $\psi(\vec{x})$, части. При этом при инфинитезимальных поворотах на углы $\omega_{jk} = \epsilon_{jkl} \varphi_l$ пространственная часть преобразуется как

$$\delta\psi(\vec{x}) = i\omega_{jk} \hat{L}_{jk}\psi(\vec{x}), \quad \hat{L}_{jk} = -i(x_j \partial_k - x_k \partial_j),$$

а спинорная как

$$\delta\chi = i\omega_{jk} \hat{\sigma}_{jk} \chi, \quad \hat{\sigma}_{jk} = \frac{i}{4} [\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = -\epsilon_{jkl} \frac{\hat{\sigma}_l}{2}.$$

Здесь, как дифференциальные \hat{L}_{jk} , так и матричные $\hat{\sigma}_{jk}$ операторы удовлетворяют коммутационным соотношениям алгебры $so(3)$:

$$[\hat{J}_{jk}, \hat{J}_{ln}] = i(\delta_{jl} \hat{J}_{kn} - \delta_{kl} \hat{J}_{jn} - \delta_{jn} \hat{J}_{kl} + \delta_{kn} \hat{J}_{jl}), \quad (109)$$

то есть задают ее соответствующие представления¹². Такую форму коммутационных соотношений алгебры $so(3)$ мы проходили в прошлом семестре наряду с более знакомой нам формой:

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\epsilon_{jkl} \hat{J}_l, \quad \hat{J}_j = \epsilon_{jkl} \hat{J}_{kl}.$$

Вспомним также, что коммутационные соотношения алгебр $so(3)$ и $su(2)$ имеют одинаковый вид. Говорят, что эти алгебры изоморфны.

¹¹Заметим мимоходом, что при замене $x_3 \rightarrow ix_0$ (обратном повороте Вика) мы получим из (106) уравнение Дирака в трехмерном пространстве-времени.

¹²На всякий случай напомним, что означает понятие “представления” в данном случае — это значит, что обсуждаемые матрицы $\hat{l}_{\mu\nu}$ подчиняются тем же коммутационным соотношениям (123). Вспомним также, что с прошлого семестра мы используем термин “представления” в несколько более широком смысле, чем это делается в математической литературе. Возможно корректнее использовать термин “реализация”, а не “представление”.

Наконец подчеркнем, что в (109) мы намеренно используем общее обозначение генераторов алгебры $so(3)$ через \hat{J}_{jk} , а не их конкретную реализацию в виде операторов \hat{L}_{jk} или $\hat{\sigma}_{jk}$. У \hat{J}_{jk} есть и другие представления, как мы знаем еще с прошлого семестра.

Решающий же уравнение (106) двухкомпонентный спинор

$$\hat{\psi}(\vec{x}) \equiv \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{x}) \\ \psi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}, \quad (110)$$

не обязательно должен факторизоваться на пространственную и спиновую части. Для определения вида его преобразования надо ввести оператор:

$$\hat{J}_{jk} \equiv \hat{L}_{jk} + \hat{\sigma}_{jk}, \quad (111)$$

который тоже задает представление алгебры (109), так как операторы \hat{L}_{jk} и $\hat{\sigma}_{jk}$ коммутируют друг с другом:

$$[\hat{L}_{jk}, \hat{\sigma}_{jk}] = 0,$$

ведь они действуют на разные гильбертовы пространства. Тогда спинор (110) преобразуется следующим образом¹³:

$$\delta\hat{\psi}(\vec{x}) = i\omega_{jk} \hat{J}_{jk} \hat{\psi}(\vec{x}),$$

при инфинитезимальных трехмерных вращениях. Преобразование же этого спинора при конечных трехмерных вращениях выглядит следующим образом¹⁴:

¹³Вспомним, что скалярное поле при координатных преобразованиях меняется как $\bar{\phi}(\bar{x}) = \phi[x(\bar{x})]$, $\bar{x}^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu$, так как не несет никаких индексов. При этом у тензорного поля, помимо замены аргумента, происходит также и преобразование каждого из индексов. Например, $\bar{A}^\mu(\bar{x}) = \Lambda^\mu_\nu A^\nu(\hat{\Lambda}^{-1}\bar{x})$. Соответственно, например, оператор алгебры $so(3)$, который генерирует инфинитезимальное вращение трехмерных векторов, имеет вид $\hat{J}_{jk} = \hat{L}_{jk} + \hat{l}_{jk}$, где \hat{l}_{jk} — это 3×3 матрицы, которые мы обсуждали еще в прошлом семестре. В случае спиноров мы имеем аналогичную ситуацию — спиновый индекс ведет себя подобно тензорному. При этом часть \hat{L} оператора \hat{J} действует на аргумент спинора, \vec{x} , а оператор $\hat{\sigma}$ — на спиновый индекс.

¹⁴Вспомним с прошлого семестра, что конечные преобразование из группы $SO(3)$ получаются экспоненцированием инфинитезимальных преобразований из соответствующей алгебры $so(3)$. А именно, чтобы получить элемент группы, надо лишь много раз применить преобразование из алгебры, что и приводит к экспоненцированию.

$$\hat{\psi}'(\vec{x}') = e^{i\omega_{jk}\hat{J}_{jk}}\hat{\psi}(\vec{x}).$$

Теперь мы готовы убедиться, что при вращениях трехмерное уравнение Дирака (106) не меняет своего вида. Вспомним, что при преобразованиях из группы $SU(2)$ имеет место следующее соотношение:

$$e^{i\omega_{jk}\hat{J}_{jk}}\hat{\sigma}_l e^{-i\omega_{jk}\hat{J}_{jk}} = e^{i\omega_{jk}\hat{\sigma}_{jk}}\hat{\sigma}_l e^{-i\omega_{jk}\hat{\sigma}_{jk}} = (e^{i\hat{\omega}})_l^n \hat{\sigma}_n,$$

где $\hat{\omega} = \|\omega_{jk}\|$. Его можно переписать как:

$$\hat{S}(\omega)\hat{\sigma}_l\hat{S}^{-1}(\omega)(e^{-i\hat{\omega}})_l^n = \hat{\sigma}_n, \quad \hat{S}(\omega) \equiv e^{i\omega_{jk}\hat{J}_{jk}}. \quad (112)$$

Теперь, помножим уравнение (106) слева на $\hat{S}(\omega)$:

$$\left[i\hbar\hat{S}(\omega)\hat{\sigma}_j\partial_j - mc\hat{S}(\omega) \right] \hat{\psi}(\vec{x}) = 0.$$

Далее, преобразуем его как

$$\left[i\hbar\hat{S}(\omega)\hat{\sigma}_j\hat{S}^{-1}(\omega)\hat{S}(\omega)\partial_j\hat{S}^{-1}(\omega)\hat{S}(\omega) - mc\hat{S}(\omega) \right] \hat{\psi}(\vec{x}) = 0.$$

Из этого получаем:

$$\left[i\hbar\hat{S}(\omega)\hat{\sigma}_j\hat{S}^{-1}(\omega)\hat{S}(\omega)\partial_j\hat{S}^{-1}(\omega) - mc \right] \hat{\psi}'(\vec{x}') = 0.$$

Теперь, учитывая, что

$$\hat{S}(\omega)\partial_j\hat{S}^{-1}(\omega) = e^{i\omega_{jk}\hat{L}_{jk}}\partial_j e^{-i\omega_{jk}\hat{L}_{jk}} = (e^{-i\hat{\omega}})_j^k \partial'_k$$

и используя соотношение (112), мы получаем уравнение:

$$\left(i\hbar\hat{\sigma}_j\partial'_j - mc \right) \hat{\psi}'(\vec{x}') = 0,$$

то есть то же самое, что и (106), но в преобразованных координатах. Это доказывает ковариантность уравнения (106) относительно трехмерных вращений.

6. Наша задача теперь определить явный вид γ -матриц и обсудить ковариантность четырехмерного уравнения Дирака (102) относительно преобразований Лоренца. Для этого сделаем следующую замену γ -матриц:

$$\hat{a}_1 = \frac{1}{2} (\gamma_0 - \gamma_1), \quad \hat{a}_1^+ = \frac{1}{2} (\gamma_0 + \gamma_1),$$

$$\hat{a}_2 = \frac{1}{2} (i \gamma_2 + \gamma_3), \quad \hat{a}_2^+ = \frac{1}{2} (i \gamma_2 - \gamma_3).$$

Тогда из соотношений Клиффорда (104) следует алгебра операторов \hat{a}_α , $\alpha = \overline{1, 2}$:

$$\left\{ \hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta^+ \right\} \equiv \hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta^+ + \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha = \delta_{\alpha\beta},$$

$$\left\{ \hat{a}_\alpha, \hat{a}_\beta \right\} = \left\{ \hat{a}_\alpha^+, \hat{a}_\beta^+ \right\} = 0. \quad (113)$$

Так как операторы с индексом $\alpha = 1$ антикоммутируют с операторами с индексом $\alpha = 2$, то мы здесь имеем две идеентичные независимые алгебры, каждая из которых имеет вид:

$$\left\{ \hat{a}, \hat{a}^+ \right\} = 1, \quad \left\{ \hat{a}, \hat{a} \right\} = \left\{ \hat{a}^+, \hat{a}^+ \right\} = 0. \quad (114)$$

Сравните ее с алгеброй Гейзенберга. В отличие от последнего случая, здесь мы имеем антикоммутатор $\{ \cdot, \cdot \}$ вместо коммутатора $[\cdot, \cdot]$. В частности из (114) следует, что

$$\hat{a}^2 = (\hat{a}^+)^2 = 0,$$

что не очень привычно при первом знакомстве, но легко реализуется, если использовать матрицы (операторы), как мы сейчас это увидим.

Изучим сначала представления алгебры (114), которая называется грассмановой или алгеброй фермионного осциллятора. Как и в случае обычного осциллятора, определим основное состояние:

$$\hat{a} |0\rangle = 0.$$

Тогда имеется еще и состояние:

$$\hat{a}^+ |0\rangle = |1\rangle,$$

а больше в данном представлении состояний нет, так как

$$(\hat{a}^+)^2 |0\rangle = 0.$$

То есть здесь ситуация даже проще, а не сложнее, чем в случае обычного (не фермионного) осциллятора. Она скорее похожа на ситуацию

со спином $1/2$, что не случайно. Действительно, операторы \hat{a} и \hat{a}^+ действуют на вектор $(|0\rangle, |1\rangle)$ следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{a} \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix}, \\ \hat{a}^+ \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{115}$$

То есть фактически \hat{a} и \hat{a}^+ действуют на данный вектор как операторы следующего вида:

$$\begin{aligned}\hat{a}^+ &= \hat{\sigma}_+ \equiv \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_1 + i\hat{\sigma}_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{a} &= \hat{\sigma}_- \equiv \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_1 - i\hat{\sigma}_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}\tag{116}$$

где $\hat{\sigma}_{1,2}$ — это матрицы Паули. Как не трудно проверить, действительно верны следующие равенства:

$$\hat{\sigma}_{\pm}^2 = 0.$$

Таким образом, соотношения (114) имеют непосредственное отношение к матрицам Паули, а потому и к представлению алгебры Клиффорда в трехмерном евклидовом пространстве, которую мы обсудили выше. Очевидно есть еще оператор, который действует на рассматриваемые векторы $|0\rangle$ и $|1\rangle$ как матрица Паули $\hat{\sigma}_3$. Он возникает, если взять коммутатор фермионных операторов \hat{a} и \hat{a}^+ , а не антикоммутатор.

7. Аналогично поиску представления алгебры (114) введем состояние

$$\hat{a}_1 |0, 0\rangle = \hat{a}_2 |0, 0\rangle = 0.$$

Тогда в данном представлении мы имеем следующий набор векторов:

$$\begin{aligned}\hat{a}_1^+ |0, 0\rangle &= |1, 0\rangle, \\ \hat{a}_2^+ |0, 0\rangle &= |0, 1\rangle, \\ \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ |0, 0\rangle &= |1, 1\rangle.\end{aligned}\tag{117}$$

Больше состояний нет в силу так называемых условий нильпотентности:

$$\hat{a}_{1,2}^2 = (\hat{a}_{1,2}^+)^2 = 0.$$

Соответственно, при действии на вектор $(|0, 0\rangle, |1, 0\rangle, |0, 1\rangle, |1, 1\rangle)$ операторы \hat{a}_α и \hat{a}_α^+ представляются 4×4 матрицами. А именно, действуя также как и в случае одной алгебры фермионного осциллятора выше, можно получить представление γ -матриц унитарно эквивалентное одному из двух общепринятых:

- спинорное (киральное) представление:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\mathbf{1}} \\ \hat{\mathbf{1}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{\sigma}^j \\ \hat{\sigma}^j & 0 \end{pmatrix}, \quad j = \overline{1, 3} \quad (118)$$

- стандартное представление:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{1}} & 0 \\ 0 & -\hat{\mathbf{1}} \end{pmatrix}, \quad \gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}^j \\ -\hat{\sigma}^j & 0 \end{pmatrix}, \quad j = \overline{1, 3} \quad (119)$$

Где каждый элемент этих блочных 2×2 матриц сам, в свою очередь, является 2×2 матрицей. В частности $\hat{\sigma}^j$ — это матрицы Паули, а $\hat{\mathbf{1}}$ — единичная 2×2 матрица. Оставляем поиск явного вида γ -матриц в качестве самостоятельного упражнения.

Данные два представления γ -матриц очевидно тоже связаны друг с другом унитарным преобразованием вида:

$$\gamma_{st}^\mu = \hat{S} \gamma_{ch}^\mu \hat{S}^{-1}, \quad \hat{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{1}} & \hat{\mathbf{1}} \\ \hat{\mathbf{1}} & -\hat{\mathbf{1}} \end{pmatrix}, \quad (120)$$

где индекс st относится к стандартному, а ch — к киральному представлениям. Из (104), (118) и (119) сразу следует, что в любом из представлений верны следующие соотношения:

$$(\gamma^0)^+ = \gamma^0, \quad (\gamma^j)^+ = -\gamma^j, \quad \gamma^0 (\gamma^j)^+ \gamma^0 = \gamma^j. \quad (121)$$

Они определяют свойства γ -матриц Дирака.

8. Теперь мы готовы показать лоренц-ковариантность четырехмерного уравнения Дирака (102). Аналогично трехмерному случаю, операторы вида

$$\hat{L}_{\mu\nu} = -i \left(x_\mu \partial_\nu - x_\nu \partial_\mu \right), \quad \mu, \nu = \overline{0, 3}, \quad (122)$$

генерируют преобразования Лоренца. Заметим, что в четырех измерениях нет аналога оператору \hat{L}_j , $j = \overline{1, 3}$, так как сопряженный через антисимметричный тензор оператор,

$$\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \hat{L}^{\rho\sigma} = \hat{L}_{\mu\nu},$$

опять имеет два индекса. Именно поэтому при подготовке к работе с операторами $\hat{L}_{\mu\nu}$ мы и ввели в прошлом семестре операторы \hat{L}_{jk} , генерирующие трехмерные вращения.

Можно проверить, что алгебра операторов (122) имеет вид:

$$\left[\hat{J}_{\mu\nu}, \hat{J}_{\rho\sigma} \right] = i \left(\eta_{\mu\rho} \hat{J}_{\nu\sigma} - \eta_{\mu\sigma} \hat{J}_{\nu\rho} - \eta_{\nu\rho} \hat{J}_{\mu\sigma} + \eta_{\nu\sigma} \hat{J}_{\mu\rho} \right). \quad (123)$$

Это алгебра $so(3, 1)$ или Лоренца. Сравните ее с соотношениями (109).

Другое представление алгебры (123) задается шестью антисимметричными матрицами ($\hat{l}_{\mu\nu} = -\hat{l}_{\nu\mu}$, $\mu, \nu = \overline{0, 3}$ и $4(4-1)/2 = 6$). Три из них задают вращения в трех пространственных плоскостях. Например, матрица

$$\left\| \hat{l}_{12} \right\| = i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

генерирует вращения вокруг оси z . Сравните ее с 3×3 матрицей \hat{l}_3 из прошлого семестра. Помимо трех вращений в алгебре $so(3, 1)$ имеются еще три генератора бустов Лоренца вдоль трех пространственных направлений. Например, матрица

$$\left\| \hat{l}_{01} \right\| = i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

порождает буст вдоль координаты x .

Далее, аналогами трехмерных операторов $\hat{\sigma}^{jk}$ в четырехмерном случае являются

$$\hat{\sigma}^{\mu\nu} = \frac{i}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \equiv \frac{i}{4} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = -\hat{\sigma}^{\nu\mu}. \quad (124)$$

Из (121), в частности, следует, что

$$\gamma^0 (\hat{\sigma}^{\mu\nu})^+ \gamma^0 = -\hat{\sigma}^{\mu\nu}.$$

Также, используя (104) можно показать, что

$$[\hat{\sigma}^{\mu\nu}, \gamma^\lambda] = i (\eta^{\nu\lambda} \gamma^\mu - \eta^{\mu\lambda} \gamma^\nu).$$

Отсюда сразу в один шаг следует, что операторы $\hat{\sigma}^{\mu\nu}$ задают еще одно представление алгебры Лоренца $so(3, 1)$, то есть подчиняются коммутационным соотношениям (123).

Поэтому, аналогично трехмерному случаю, получаем, что операторы

$$\hat{J}_{\mu\nu} \equiv \hat{L}_{\mu\nu} + \hat{\sigma}_{\mu\nu}$$

тоже задают представление алгебры Лоренца. Они определяют то, как при преобразованиях Лоренца меняются четырех-компонентные спиноры:

$$\Psi'(\underline{x}') = e^{i\omega_{\mu\nu} \hat{J}^{\mu\nu}} \Psi(\underline{x}) \equiv \hat{S}(\omega) \Psi(\underline{x}).$$

При этом, операторы $\hat{L}_{\mu\nu}$ действуют на пространственные “индексы” \underline{x} , тогда как $\hat{\sigma}_{\mu\nu}$ — на спинорные.

В частности, получаются соотношения, аналогичные тем, что возникали в трехмерном случае:

$$\begin{aligned} \hat{S}(\omega) x^\mu \hat{S}^{-1}(\omega) &= (e^{i\hat{\omega}})_\nu^\mu x^\nu, \\ \hat{S}(\omega) \partial^\mu \hat{S}^{-1}(\omega) &= (e^{-i\hat{\omega}})_\nu^\mu \partial^\nu, \\ \hat{S}(\omega) \gamma^\mu \hat{S}^{-1}(\omega) &= (e^{i\hat{\omega}})_\nu^\mu \gamma^\nu. \\ \hat{\omega} &= \|\omega_{\mu\nu}\| = \omega_{\mu\nu} \hat{l}^{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (125)$$

Используя эти соотношения, абсолютно аналогично трехмерному случаю можно доказать, что уравнение Дирака (102) ковариантно относительно преобразований группы Лоренца $SO(3, 1)$.

V. Лекция. *Представления алгебры Лоренца, алгебра Пуанкаре и ее представления, гамильтониан Дирака, вектор Паули–Любанского, сопряженный спинор и четырехвектор плотности потока вероятности, свободные спиноры Дирака.*

1. Обсудим теперь конечномерные представления алгебры Лоренца $so(3, 1)$, которые аналогичны конечномерным представлениям алгебры $so(3)$, найденным в прошлом семестре. Одно такое представление мы уже знаем — оно задается операторами $\hat{\sigma}_{\mu\nu}$ и отвечает спинорам, другое — матрицами $\hat{I}_{\mu\nu}$ и отвечает четыревекторам. Так, что можно ожидать, что ситуация будет аналогична той, что мы встречали в прошлом семестре для $so(3)$.

Чтобы построить искомые представления, желательно свести задачу к уже известной нам. Для этого из операторов $\hat{J}_{\mu\nu} = -\hat{J}_{\nu\mu}$, $\mu, \nu = \overline{0, 3}$ алгебры (123) можно выделить \hat{J}_{jk} , $j, k = \overline{1, 3}$ и \hat{J}_{0j} . Генераторы \hat{J}_{jk} отвечают за вращения в трехмерной пространственной части, а \hat{J}_{0j} — за бусты Лоренца.

Далее можно ввести следующие обозначения:

$$\hat{J}_j = \frac{1}{2} \epsilon_{jkl} \hat{J}_{kl}, \quad \hat{K}_j \equiv \hat{J}_{0j}. \quad (126)$$

Подчеркнем, что генераторы $\hat{J}_{\mu\nu}$ и, соответственно, \hat{K}_j и \hat{J}_j являются эрмитовыми операторами.

Как мы уже знаем, операторы \hat{J}_j подчиняются коммутационным соотношениям алгебры $so(3) \cong su(2)$, одна из форм записи которой имеет вид:

$$\left[\hat{J}_j, \hat{J}_k \right] = i \epsilon_{jkl} \hat{J}_l. \quad (127)$$

Она эквивалентна (109), как мы знаем с прошлого семестра. Также можно проверить, что из соотношений (123) алгебры $so(3, 1)$ следует, что:

$$\left[\hat{K}_j, \hat{K}_k \right] = -i \epsilon_{jkl} \hat{J}_l, \quad \left[\hat{J}_j, \hat{K}_k \right] = i \epsilon_{jkl} \hat{K}_l. \quad (128)$$

Как видно, генераторы бустов Лоренца \hat{K}_j , в отличие от генераторов вращений \hat{J}_j , не образуют отдельной алгебры. Коммутатор двух генераторов бустов сводится к вращению. Этот факт мы проходили при

решении одной из задач в курсе теории поля, когда увидели, что бусты Лоренца вдоль перпендикулярных направлений не перестановочны.

Чтобы двигаться дальше, введем неэрмитовы операторы:

$$\hat{N}_j = \frac{1}{2} (\hat{J}_j + i \hat{K}_j), \quad \hat{N}_j^+ = \frac{1}{2} (\hat{J}_j - i \hat{K}_j), \quad (129)$$

которые удобны по следующей причине. Как следует из (127) и (128) эти операторы подчиняются коммутационным соотношениям вида:

$$\begin{aligned} [\hat{N}_j, \hat{N}_k^+] &= 0, \\ [\hat{N}_j, \hat{N}_k] &= i \epsilon_{jkl} \hat{N}_l, \\ [\hat{N}_j^+, \hat{N}_k^+] &= i \epsilon_{jkl} \hat{N}_l^+. \end{aligned} \quad (130)$$

То есть \hat{N}_j и \hat{N}_j^+ по отдельности задают алгебру $so(3) \cong su(2)$. Это означает, что алгебра Лоренца разбивается в прямую сумму вида $so(3,1) \cong su(2) \oplus su(2)$. (Аналогичную ситуацию мы встречали на предыдущей лекции в случае алгебры Клиффорда, когда представляли ее в виде двух алгебр фермионного осциллятора.) Однако две эти алгебры $su(2)$ отображаются друг в друга при пространственной инверсии $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$, так как при таком преобразовании получается, что $\hat{K}_j \rightarrow -\hat{K}_j$, а $\hat{J}_j \rightarrow \hat{J}_j$, то есть $\hat{N}_j \rightarrow \hat{N}_j^+$. Но операция инверсии не принадлежит $SO(3)$ полученной экспоненцированием (109).

Сделанные наблюдения позволяют строить представления $so(3,1)$ из представлений $so(3) \cong su(2)$. Как мы знаем с прошлого семестра, представления алгебры $su(2)$ классифицируются числом $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$, которое определяет собственное число оператора \hat{J}^2 , $j(j+1)$. Эти представления задаются $(2j+1) \times (2j+1)$ -матрицами, а векторы в соответствующих представлениях имеют вид $|j, m\rangle$, где $-j \leq m \leq j$.

Таким образом, интересные нам представления $so(3,1)$ можно классифицировать при помощи пары чисел (N, M) , где N и M играют ту же роль, что и j для алгебры $su(2)$. Соответственно, $N(N+1)$ является собственным числом оператора \vec{N}^2 , а $M(M+1)$ — оператора $(\vec{N}^+)^2$. При этом $N, M = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$

Внутри представления (N, M) состояния нумеруются квантовыми числами операторов проекций на ось z : \hat{N}_3 и \hat{N}_3^+ . Заметим, что,

также как и \hat{J}^2 в алгебре $su(2)$, операторы \vec{N}^2 и $(\vec{N}^+)^2$ коммутируют со всеми генераторами $so(3,1)$. То есть являются так называемыми операторами Казимира.

Соответственно обсуждаемому разбиению генераторов $so(3,1)$ на \vec{N}_j и \vec{N}_j^+ четырехкомпонентные спиноры под действием этой алгебры разбиваются как:

$$\hat{\Psi}(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \hat{\phi}_R(\underline{x}) \\ \hat{\phi}_L(\underline{x}) \end{pmatrix}, \quad (131)$$

где $\hat{\phi}_{R,L}(\underline{x})$ имеют по две компоненты. Такое разбиение как (131) отвечает спинорному или киральному представлению γ -матриц (118).

Действительно, рассмотрим состояния $|N, M\rangle = |1/2, 0\rangle$ и $|N, M\rangle = |0, 1/2\rangle$, где для упрощения формул в обозначении состояний мы опустили значения собственных чисел операторов \hat{N}_3 и \hat{N}_3^+ , каждое из которых в данном случае может принимать два значения $\pm 1/2$. Очевидно для этих состояний верно, что

$$\hat{N} |0, 1/2\rangle = 0, \quad \hat{N}^+ |1/2, 0\rangle = 0,$$

то есть из (129) следует, что

$$\hat{J} |0, 1/2\rangle = -i \vec{K} |0, 1/2\rangle, \quad \hat{J} |1/2, 0\rangle = i \vec{K} |1/2, 0\rangle.$$

Соответственно, при действии на

$$\hat{\phi}_R(\underline{x}) \equiv \langle \underline{x} | 1/2, 0 \rangle,$$

где не указаны явно спинорные индексы, которые отвечают различным значениям оператора проекции \hat{N}_3 , мы имеем, что

$$\hat{J} = \frac{\hat{\sigma}}{2}, \quad \vec{K} = -i \frac{\hat{\sigma}}{2},$$

ведь, как мы знаем с прошлого семестра, операторы вращения действуют на двухкомпонентные спиноры как $\hat{\sigma}/2$. Далее, при действии на

$$\hat{\phi}_L(\underline{x}) \equiv \langle \underline{x} | 0, 1/2 \rangle$$

мы получаем соответственно, что

$$\hat{J} = \frac{\hat{\sigma}}{2}, \quad \hat{K} = i \frac{\hat{\sigma}}{2}.$$

Поэтому при преобразованиях из группы $SO(3, 1)$ мы получаем, что двухкомпонентные части четырехкомпонентного спинора преобразуются как¹⁵:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_R &\rightarrow e^{i \frac{\hat{\sigma}}{2} (\vec{\varphi} - i \vec{\rho})} \hat{\phi}_R, \\ \hat{\phi}_L &\rightarrow e^{i \frac{\hat{\sigma}}{2} (\vec{\varphi} + i \vec{\rho})} \hat{\phi}_L, \end{aligned} \quad (132)$$

где $\vec{\varphi}$ — три действительных параметра, отвечающие за пространственные вращения, а $\vec{\rho}$ — три действительных параметра, отвечающие лоренцевым бустам вдоль трех направлений.

Однако с этими соотношениями возникает проблема. Видно, что они не унитарны из-за наличия бустов $\exp \left\{ \pm i \frac{\hat{\sigma} \vec{\rho}}{2} \right\}$. Сравните это с преобразованиями вращения $\exp \left\{ \pm i \frac{\hat{\sigma} \vec{\varphi}}{2} \right\}$. Наличие мнимой единицы в экспоненте принципиально важно.

Это связано с тем, что группа $SO(3, 1)$ некомпактна в отличие от $SO(3)$ или $SU(2)$. Мы здесь имеем дело с несколько более сложным вариантом следующей ситуации. Вектор $(\cos \varphi, \sin \varphi)$ под действием группы $SO(2)$ совершает вращения. Поэтому групповое пространство $SO(2)$ компактно. Конец же вектора $(\text{ch} \rho, \text{sh} \rho)$ под действием группы $SO(1, 1)$ движется по некомпактной гиперболе. Поэтому групповое пространство $SO(1, 1)$ некомпактно.

Проблема с этим связанная заключается в следующем. В прошлом семестре мы заключили, что для квантовой механики важны унитарные симметрии, которые сохраняют скалярные произведения векторов состояний, то есть амплитуды вероятностей перехода. То есть мы здесь вроде пришли к неудовлетворительному результату с фундаментальной точки зрения. Как решается эта проблема, мы обсудим чуть ниже.

2. В прошлом семестре мы обсуждали алгебры $so(3)$, $su(2)$ и их представления, так как они являлись симметриями уравнений

¹⁵Эти соотношения можно получить и прямо из вида преобразования четырехкомпонентного спинора $\hat{\Psi} \rightarrow e^{i \hat{\sigma}^{\mu\nu} \omega^{\mu\nu}} \hat{\Psi}$, если использовать спинорное представление γ -матриц и обозначения $\omega_{0j} = \rho_j$, $\omega_{jk} = \frac{1}{2} \epsilon_{jkl} \varphi_l$. Подчеркнем также, что в этих преобразованиях мы следим только за тем как изменяются спинорные столбцы, но не их функциональная часть, то есть здесь написаны преобразования постоянных, не зависящих от \underline{x} , спиноров.

Шредингера для свободной частицы и даже для частицы в сферически симметричном потенциале. Это позволяло нам находить решения таких уравнений. Выше мы рассматривали алгебру Лоренца, так как она определяет естественные симметрии свободных уравнений ШФКГ и Дирака. Также мы рассматривали алгебру Клиффорда, которая тесно связана с алгеброй Лоренца, а точнее со спинорным представлением последней.

Оказывается для физики элементарных частиц более фундаментальное значение, чем $so(3, 1)$, имеет алгебра Пуанкаре, которая включает в себя алгебру Лоренца и определяет естественные симметрии уравнений ШФКГ и Дирака. Алгебра Пуанкаре, наряду с вращениями и бустами Лоренца, содержит еще и трансляции в пространстве–времени. То есть в ней, кроме шести $\vec{\varphi}$ и $\vec{\rho}$, которые присутствуют в $so(3, 1)$, имеется плюс еще четыре параметра, определяющие четыре вектора вдоль которых совершена трансляция.

Генераторы трансляций, как мы знаем, — это операторы $\hat{P}_\mu = -i \partial_\mu$. Тогда, помимо (123) в алгебре Пуанкаре содержатся следующие коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu \right] = 0, \quad \left[\hat{P}_\mu, \hat{J}_{\rho\sigma} \right] = i \left(\eta_{\mu\rho} \hat{P}_\sigma - \eta_{\mu\sigma} \hat{P}_\rho \right). \quad (133)$$

Первое соотношение означает, что трансляции вдоль любых двух направлений можно переставлять. Второе соотношение имеет вид общего изменения любого четырех–вектора при инфинитезимальном преобразовании из группы Лоренца. Коммутационные соотношения (123) и (133) вместе задают замкнутую алгебру Пуанкаре, генераторами которой являются \hat{P}_μ и $\hat{J}_{\mu\nu}$.

Чтобы разобраться с представлениями этой алгебры, вспомним, что гамильтониан свободной частицы отвечает за трансляции во времени, то есть $\hat{H} \leftrightarrow i \hbar \partial_t$. Тогда, в частности, из (133) следует, что операторы $\vec{\hat{P}}$ и $\vec{\hat{J}}$ коммутируют с гамильтонианом свободной частицы, $\hat{H} \sim \hat{P}_0$.

Действительно, если переписать уравнение Дирака в форме нестационарного уравнения Шредингера:

$$i \hbar \partial_t \hat{\Psi} = \left(-i \hbar c \hat{\alpha} \vec{\partial} + m c^2 \hat{\beta} \right) \hat{\Psi} \equiv \hat{H} \hat{\Psi},$$

$$\hat{\alpha}_j = (\gamma^0)^{-1} \gamma_j = \gamma^0 \gamma_j, \quad \hat{\beta} = \gamma^0, \quad (\gamma^0)^2 = 1 \quad (134)$$

то можно увидеть, что гамильтониан Дирака \hat{H} коммутирует с оператором трансляций $\vec{\partial}$. Чтобы понять, что \hat{H} также коммутирует и с

оператором вращений \hat{J} надо вспомнить наше доказательство ковариантности уравнения Дирака относительно преобразований Лоренца.

Однако из (133) также следует, что операторы бустов \hat{K} не коммутируют с $\partial_0 \equiv \partial_t$ и, соответственно, с \hat{H} . Действительно, бусты Лоренца меняют энергию — нулевую компоненту четырехвектора импульса. В частности с этим связан тот факт, что группа Лоренца не унитарна, а ее пространство параметров некомпактно, ведь энергия может меняться неограниченно.

Чтобы построить представления алгебры Пуанкаре заметим, что оператор $\hat{C}_1 = P_\mu P^\mu$ коммутирует со всеми генераторами алгебры в силу соотношений (133), так как является лоренц-инвариантом. Как мы уже знаем, такая величина называется оператором Казимира и удобна для классификации представлений.

Оказывается в алгебре Пуанкаре есть еще один оператор Казимира¹⁶. Он строится из так называемого псевдовектора Паули-Любанского:

$$\hat{W}_\mu = -\frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \hat{J}^{\nu\rho} \hat{P}^\sigma. \quad (135)$$

Действительно можно показать, что $\hat{C}_2 = \hat{W}^\mu \hat{W}_\mu$ коммутирует и с $\hat{J}_{\mu\nu}$ и с \hat{P}_μ . Оставляем это в качестве самостоятельного упражнения.

Таким образом представления алгебры Пуанкаре классифицируются собственными числами операторов $\hat{C}_1 = P_\mu P^\mu$ и $\hat{C}_2 = \hat{W}^\mu \hat{W}_\mu$. Собственное число оператора \hat{C}_1

$$\hbar^2 \hat{C}_1 |m\rangle = (mc)^2 |m\rangle,$$

очевидно имеет смысл массы. А векторы в представлении, соответственно, параметризуются собственными значениями оператора импульса, \vec{p} . То есть \vec{p} играет роль аналогичную проекции оператора момента вращения в алгебре $so(3)$, только принимает непрерывные значения, так как обсуждаемая группа некомпактна (неунитарна).

Действительно, из уравнения $p_\mu p^\mu = (mc)^2$, где p_μ является собственным числом оператора $\hbar P_\mu$, мы получаем уравнение гиперболоида: см. рис. 13. Под действием группы Лоренца четырехвектор p_μ меняется внутри представления, так как меняется \vec{p} , но при этом гиперболоид $p_0^2 - \vec{p}^2 = (mc)^2$ остается неизменным. (Вспомните из курса

¹⁶Вспомним, что в $so(3, 1)$ их тоже два: \hat{N}^2 и $(\hat{N}^+)^2$.

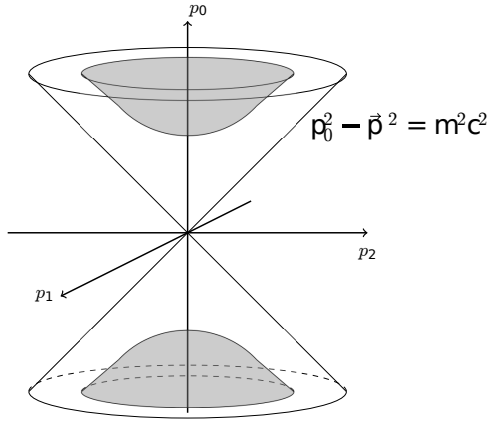


Рис. 13:

теории поля, что группа Лоренца сохраняет соответствующую билинейную форму.) Причем при преобразованиях Лоренца не меняется также и знак p_0 , то есть $\text{sign}(p_0)$ тоже является лоренц-инвариантом. Трансляции в пространстве-времени не меняют ни p_0 , ни \vec{p} . Таким образом неунитарность группы Лоренца связана, в частности, с тем фактом, что конец четырех-вектора p_μ описывает некомпактный гиперболоид под ее действием.

Обсудим теперь смысл собственных чисел оператора Казимира $\hat{C}_2 = \hat{W}_\mu \hat{W}^\mu$. Для начала рассмотрим собственные числа оператора \hat{W}_μ . Так как в системе покоя $p^\mu = (m c, \vec{0})$ и, как следует из (135), $\hat{P}_\mu \hat{W}^\mu = 0$, то собственное число \hat{W}_μ должно иметь вид $w^\mu = (0, \vec{w})$. Причем $\hat{W}_j = -\frac{1}{2} \epsilon_{j\nu\rho\sigma} \hat{J}^{\nu\rho} \hat{P}^\sigma = -\frac{m c}{2} \epsilon_{jkl0} \hat{J}^{kl} = m c \hat{J}_j$, где

$$\hat{J}_j = \hat{L}_j + \hat{\Sigma}_j, \quad \hat{\Sigma}_j = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_j/2 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_j/2 \end{pmatrix}. \quad (136)$$

Таким образом в системе покоя \hat{W}_j сводится к оператору трехмерных вращений. Это значит, что собственные числа оператора $\hat{C}_2 = \hat{W}_\mu \hat{W}^\mu$ можно записать в виде

$$\lambda = -(m c)^2 s(s+1), \quad s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots,$$

как мы знаем из опыта работы с представлениями алгебры трехмерных вращений.

Итак, состояния из представлений алгебры Пуанкаре, вместо $|N, M\rangle$, задаются в виде $|m, \vec{p}, s, s_3\rangle$, где m — масса, а s — релятивистское обобщение спина. Два числа m и s определяют представления, как j определяет представление алгебры $so(3)$, а \vec{p} и s_3 определяют состояния внутри представления, как это делает проекция момента в представлениях $so(3)$.

Все это было верно в случае массы отличной от нуля. Если же масса равна нулю, $m = 0$, то в соответствующем представлении алгебры Пуанкаре мы имеем $p_\mu p^\mu = 0$ и $w_\mu w^\mu = 0$, то есть это светоподобные вектора и $p_\mu w^\mu = 0$. Можно показать, что они пропорциональны друг другу, то есть $w_\mu = \pm s p_\mu$, где коэффициент пропорциональности, s , называется спиральностью или спином. Он может принимать значения $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. В таком случае состояния имеют вид $|0, \vec{p}, s, \pm\rangle$, и безмассовая частица с любым спином $s \neq 0$ всегда имеет лишь две степени свободы в четырехмерном пространстве–времени.

Этими наблюдениями мы заканчиваем наше обсуждение представлений алгебр Лоренца и Пуанкаре.

3. Обсудим теперь как из уравнения Дирака определить плотность потока вероятности. Также мы должны объяснить почему скалярные произведения векторов состояний в релятивистском случае не меняются при преобразованиях Лоренца, не смотря на то, что группа $SO(3, 1)$ не является унитарной.

Из (132) мы знаем как меняются спиноры при преобразованиях Лоренца. При трансляциях они преобразуются как скаляры. Далее, из (132) следует, что сопряженные спиноры преобразуются как

$$\begin{aligned}\hat{\phi}_R^+ &\rightarrow \hat{\phi}_R^+ e^{-i \frac{\hat{\sigma}}{2} (\vec{\varphi} + i \vec{p})}, \\ \hat{\phi}_L^+ &\rightarrow \hat{\phi}_L^+ e^{-i \frac{\hat{\sigma}}{2} (\vec{\varphi} - i \vec{p})}.\end{aligned}\tag{137}$$

В результате из (132) и (137) видно, что величина

$$\hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} = \hat{\phi}_R^+ \hat{\phi}_R + \hat{\phi}_L^+ \hat{\phi}_L$$

не является лоренц-инвариантом, потому что \vec{p} часть преобразования не сокращается между $\hat{\phi}_{L,R}^+$ и $\hat{\phi}_{L,R}$. Однако, если определить сопряженный спинор как

$$\hat{\bar{\Psi}} \equiv \hat{\Psi}^+ \gamma^0 = \left(\hat{\phi}_R^+, \hat{\phi}_L^+ \right) \begin{pmatrix} 0 & \hat{\mathbf{1}} \\ \hat{\mathbf{1}} & 0 \end{pmatrix} = \left(\hat{\phi}_L^+, \hat{\phi}_R^+ \right),$$

а не просто как $\hat{\Psi}^+$, то величина

$$\widehat{\Psi} \widehat{\Psi} = \widehat{\Psi}^+ \gamma^0 \widehat{\Psi} = \widehat{\phi}_L^+ \widehat{\phi}_R + \widehat{\phi}_R^+ \widehat{\phi}_L$$

является лоренц-инвариантом, потому что теперь $\vec{\rho}$ часть преобразования сокращается между $\widehat{\phi}_{L,R}^+$ и $\widehat{\phi}_{R,L}$, соответственно.

Более того, запишем уравнение Дирака (102) в виде:

$$\left(i \hbar \gamma^0 \partial_0 + i \hbar \gamma^j \partial_j - m c \right) \widehat{\Psi} = 0,$$

и сопряжем его, используя соотношения $(\gamma^0)^+ = \gamma^0$ и $(\gamma^j)^+ = -\gamma^j$, найденные на прошлой лекции:

$$\widehat{\Psi}^+ \left(-i \hbar \gamma^0 \overleftarrow{\partial}_0 + i \hbar \gamma^j \overleftarrow{\partial}_j - m c \right) = 0, \quad (138)$$

где стрелка указывает на какую функцию действуют соответствующие дифференциальные операторы. Заметим, что мы поставили $\widehat{\Psi}^+$ слева от оператора, потому что это строка, а не столбец. Фактически (138) является просто удобной формой записи следующего уравнения:

$$-i \hbar \partial_0 \left(\widehat{\Psi}^+ \gamma^0 \right) + i \hbar \partial_j \left(\widehat{\Psi}^+ \gamma^j \right) - m c \widehat{\Psi}^+ = 0.$$

Полученное сопряженное уравнение (138) не имеет явного лоренц-ковариантного вида. Однако, если умножить его справа на γ^0 и использовать соотношение $\gamma^j \gamma^0 = -\gamma^0 \gamma^j$, которое следует из алгебры Клиффорда, то мы получаем явно ковариантное уравнение на $\widehat{\Psi}$:

$$\widehat{\Psi} \left(i \hbar \gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu + m c \right) = 0. \quad (139)$$

Это еще одно независимое подтверждение того, что сопряженным спинором к $\widehat{\Psi}$ является менно $\widehat{\Psi}$, а не $\widehat{\Psi}^+$.

Таким образом, скалярное произведение двух четырехмерных спиноров определено как $\widehat{\Psi}_1^+ \widehat{\Psi}_2$, а не как $\widehat{\Psi}_1^+ \widehat{\Psi}_2$, и не меняется при бустах Лоренца. Именно так определенное скалярное произведение сохраняется несмотря на неунитарность группы Лоренца.

Далее, рассмотрим четыре-вектор вида

$$j_\mu \equiv \widehat{\Psi} \gamma_\mu \widehat{\Psi}.$$

Можно показать, что при преобразованиях Лоренца он меняется именно как четыре-вектор, что отвечает наличию у него одного индекса μ . Оставляем это в качестве упражнения.

Этот четыре–вектор сохраняется:

$$\begin{aligned} \partial_\mu j^\mu &= \left(\partial_\mu \hat{\Psi} \right) \gamma^\mu \hat{\Psi} + \hat{\Psi} \gamma^\mu \left(\partial_\mu \hat{\Psi} \right) = \\ &= \left(\frac{i m c}{\hbar} \hat{\Psi} \right) \hat{\Psi} + \hat{\Psi} \left(-\frac{i m c}{\hbar} \hat{\Psi} \right) = 0, \end{aligned}$$

где на предпоследнем шаге мы использовали уравнение Дирака (102) и сопряженное уравнение (139). Соответственно, j_μ и есть четыре–вектор плотности вероятности. Его нулевая компонента (плотность вероятности) равна:

$$j^0 = \hat{\Psi} \gamma^0 \hat{\Psi} = \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} = \hat{\phi}_R^+ \hat{\phi}_R + \hat{\phi}_L^+ \hat{\phi}_L \geq 0.$$

Как мы увидим на одной из следующих лекций, именно эта величина сводится к известной нам с прошлого семестра плотности вероятности в нерелятивистском пределе. Таким образом, мы видим, что проблема с плотностью вероятности для уравнения ШФКГ теперь отсутствует, как мы и ожидали.

4. Приобретенные знания позволят нам теперь найти также решения свободного уравнения Дирака. Напомним, что свободные волны, $\Phi = e^{-i \underline{p} \underline{x}}$, решают уравнение ШФКГ, если $\underline{p}^2 = m^2 c^2$. Случай $m = 0$ мы рассматривали на курсе теории поля. Сейчас мы хотим получить подобный полный базис решений уравнения Дирака.

Нам сейчас удобнее работать с уравнением Дирака записанным в форме (134). Так как $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$ для свободной частицы, то будем искать решение в виде:

$$\hat{\Psi}(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \hat{\phi}_R \\ \hat{\phi}_L \end{pmatrix} e^{-\frac{i E t - i \underline{p} \underline{x}}{\hbar}}, \quad (140)$$

где два спинора $\hat{\phi}_{R,L}$ от \underline{x} уже не зависят. Если это выражение подставить в уравнение (134) и использовать явный вид матриц $\hat{\alpha}$ в стандартном представлении:

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (141)$$

то получим соотношения:

$$\begin{aligned}
c \left(\hat{\sigma}, \vec{p} \right) \hat{\phi}_L &= (E - m c^2) \hat{\phi}_R, \\
c \left(\hat{\sigma}, \vec{p} \right) \hat{\phi}_R &= (E + m c^2) \hat{\phi}_L.
\end{aligned}
\tag{142}$$

Подчеркнем, что мы здесь используем киральное (или спинорное) представление γ -матриц (118), которое было введено на прошлой лекции.

Полученные два уравнения на $\hat{\phi}_{L,R}$ совместны, если

$$c^2 \left(\hat{\sigma}, \vec{p} \right) \left(\hat{\sigma}, \vec{p} \right) = E^2 - m^2 c^4.$$

Чтобы получить это соотношение надо применить к обеим сторонам первого из уравнений в (142) слева оператор $\left(\hat{\sigma}, \vec{p} \right)$, а затем использовать второе из уравнений (142). Далее, используя тождество

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}} + i \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l,$$

приходим к равенству:

$$E = \pm \sqrt{c^2 \vec{p}^2 + m^2 c^4}.$$

Такому соотношению должны удовлетворять E и \vec{p} , чтобы спинор (140) решал уравнение Дирака.

Заметим, что фактически проведенные здесь преобразования эквивалентны тем, что мы использовали на прошлой лекции для получения уравнения ШФКГ из Дирака. Подчеркнем, что, как мы заметили выше, знак $E \equiv p_0 c$ является лоренц-инвариантом и квантовым числом. Ниже мы увидим, что у уравнения Дирака есть решения с обоими знаками у E .

Таким образом, возникает проблема с наличием решений с отрицательной энергией. И отбросить их нельзя, ибо тем самым мы отбросим часть полного базиса решений уравнения Дирака. Последовательно эта проблема решается в квантовой теории поля в рамках вторичного квантования, с которым мы познакомимся на одной из последующих лекций, и с использованием теоремы Паули о связи спина со статистикой, которая выходит за рамки нашего курса.

Однако Дирак, еще до разработки методов квантовой теории поля предложил следующее решение этой проблемы, которое привело к предсказанию анти-частиц. (То есть решения уравнения Дирака описывают не только электроны, но и позитроны.)

Дирак предположил, что с учетом принципа Паули все уровни с отрицательной энергией $p_0 < 0$ заполнены. Это так называемое море Дирака. Электрон — это состояние с положительной энергией $p_0 > 0$. А позитрон (анти-частица) — это дырка в спектре с отрицательными энергиями (недостающий электрон)¹⁷. Если электрон сталкивается с позитроном, то он садится на этот уровень с $p_0 < 0$. При этом разница энергий между исходным положением электрона в спектре, $p_0 > 0$, и конечным, $p_0 < 0$, высвобождается в виде гамма-квантов. Так происходит так называемый процесс аннигиляции частицы и анти-частицы.

Чтобы найти решения уравнения Дирака, найдем их сначала в системе покоя, $\vec{p} = 0$, а затем сделаем буст Лоренца. В состоянии покоя, $\vec{p} = 0$, для плоской волны (140) уравнение Дирака приобретает очень простой вид:

$$\hbar \gamma^0 p_0 \hat{\Psi}_p = m c \hat{\Psi}_p, \quad \hat{\Psi}_p \equiv \begin{pmatrix} \hat{\phi}_R \\ \hat{\phi}_L \end{pmatrix}$$

То есть мы получили уравнение на собственные векторы матрицы γ^0 . У нее имеется четыре собственных числа (два $+1$ и два -1), что сразу заметно из ее вида в стандартном представлении. Собственные решения в этом случае имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\underline{x}) &= u(\vec{p}=0) e^{-i \frac{m c^2 t}{\hbar}}, \quad p_0 > 0, \\ \hat{\Psi}(\underline{x}) &= v(\vec{p}=0) e^{i \frac{m c^2 t}{\hbar}}, \quad p_0 < 0, \end{aligned} \quad (143)$$

где имеется по две возможности для каждого из собственных векторов γ^0 , то есть по два вектора $u(0)$ и $v(0)$ для каждого из собственных чисел ± 1 :

$$\begin{aligned} u^{(1)}(0) &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(2)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ v^{(1)}(0) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v^{(2)}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (144)$$

¹⁷ Прямо такая картина реализуется в твердых телах, где валентные электроны от атомов в кристалле заполняют уровни энергии до поверхности Ферми.

Таким образом, мы имеем два решения с положительной энергией и два с отрицательной.

Так как при поиске собственных чисел и векторов матрицы γ^0 мы использовали диагональный ее вид, как в (119), а не (118), то найденный спинор (143) отвечает стандартному представлению γ -матриц. А мы знаем как меняются при преобразованиях Лоренца спиноры в киральном представлении. При этом, мы знаем, что под действием буста Лоренца

$$e^{\pm i \frac{m c^2 t}{\hbar}} \rightarrow e^{\pm i \frac{p \cdot x}{\hbar}}$$

Теперь вспомним, что киральное и стандартное представления γ -матриц связаны унитарным преобразованием вида

$$\gamma_{st}^\mu = \hat{S} \gamma_{ch}^\mu \hat{S}^{-1}, \quad \hat{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{1}} & \hat{\mathbf{1}} \\ \hat{\mathbf{1}} & -\hat{\mathbf{1}} \end{pmatrix}.$$

В результате мы имеем, что спинор Дирака в стандартном представлении имеет вид:

$$\hat{\Psi} = \hat{S} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_R \\ \hat{\phi}_L \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \hat{\phi}_R + \hat{\phi}_L \\ \hat{\phi}_R - \hat{\phi}_L \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \hat{\phi} \\ \hat{\chi} \end{pmatrix} \quad (145)$$

Эта связь поможет нам применить буст Лоренца (132) к решению (143). Таким способом мы найдем решение при произвольном значении импульса \vec{p} . А именно, из (132) мы знаем, что при преобразованиях Лоренца, спиноры $\hat{\phi}_{L,R}$ меняются как:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}'_R &= e^{\frac{(\hat{\sigma}, \vec{p})}{2}} \hat{\phi}_R = \left[\text{ch} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) + (\hat{\sigma} \vec{n}) \text{sh} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) \right] \hat{\phi}_R, \\ \hat{\phi}'_L &= e^{-\frac{(\hat{\sigma}, \vec{p})}{2}} \hat{\phi}_L = \left[\text{ch} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) - (\hat{\sigma} \vec{n}) \text{sh} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) \right] \hat{\phi}_L, \end{aligned}$$

где мы положили $\vec{\varphi} = 0$, так как совершаем только бусты, но не повороты, и $\vec{n} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$ — единичный вектор вдоль направления буста. При получении этого выражения мы использовали, что $(\hat{\sigma}, \vec{n})^2 = \hat{\mathbf{1}}$.

После поворота к стандартному представлению матрица буста перестает быть блок-диагональной:

$$\begin{aligned}
\hat{M} &= \hat{S} \begin{pmatrix} e^{\frac{(\hat{\sigma} \vec{p})}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{(\hat{\sigma} \vec{p})}{2}} \end{pmatrix} \hat{S}^{-1} = \\
&= \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{1}} \operatorname{ch} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) & (\hat{\sigma} \vec{n}) \operatorname{sh} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) \\ -(\hat{\sigma} \vec{n}) \operatorname{sh} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) & \hat{\mathbf{1}} \operatorname{ch} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) \end{pmatrix}. \tag{146}
\end{aligned}$$

Далее, так как

$$\operatorname{ch} |\vec{p}| = \gamma = \frac{E}{m c^2},$$

то

$$\begin{aligned}
\operatorname{ch} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) &= \sqrt{\frac{E + m c^2}{2 m c^2}}, \quad \operatorname{sh} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) = \sqrt{\frac{E - m c^2}{2 m c^2}} \\
\operatorname{th} \left(\frac{|\vec{p}|}{2} \right) &= \frac{|\vec{p}| c}{E + m c^2}, \quad |\vec{p}| c = \sqrt{E^2 - m^2 c^4}.
\end{aligned}$$

В результате, матрица (146) имеет вид:

$$\hat{M} = \sqrt{\frac{E + m c^2}{2 m c^2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{p_z c}{E + m c^2} & \frac{p_- c}{E + m c^2} \\ 0 & 1 & \frac{p_+ c}{E + m c^2} & \frac{-p_z c}{E + m c^2} \\ \frac{p_z c}{E + m c^2} & \frac{p_- c}{E + m c^2} & 1 & 0 \\ \frac{p_+ c}{E + m c^2} & \frac{-p_z c}{E + m c^2} & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{147}$$

а соответствующие спиноры (143) после буста преобразуются в:

$$\begin{aligned}
\hat{\Psi}^{(a)}(\underline{x}) &= u^{(a)}(p) e^{-i \frac{p \cdot x}{\hbar}}, \quad p_0 > 0, \\
\hat{\Psi}^{(a)}(\underline{x}) &= v^{(a)}(p) e^{i \frac{p \cdot x}{\hbar}}, \quad p_0 < 0,
\end{aligned}$$

где $a = 1, 2$, а $p_{\pm} = p_x \pm i p_y$ и

$$u^{(1)}(p) = \sqrt{\frac{E + m c^2}{2 m c^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z c}{E + m c^2} \\ \frac{p_+ c}{E + m c^2} \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}
u^{(2)}(\underline{p}) &= \sqrt{\frac{E + m c^2}{2 m c^2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_- c}{E + m c^2} \\ \frac{-p_z c}{E + m c^2} \end{pmatrix}, \\
v^{(1)}(\underline{p}) &= \sqrt{\frac{E + m c^2}{2 m c^2}} \begin{pmatrix} \frac{p_z c}{E + m c^2} \\ \frac{p_+ c}{E + m c^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
v^{(2)}(\underline{p}) &= \sqrt{\frac{E + m c^2}{2 m c^2}} \begin{pmatrix} \frac{p_- c}{E + m c^2} \\ \frac{-p_z c}{E + m c^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{148}$$

Представленные здесь спиноры удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\bar{u}^{(a)} u^{(b)} = u^{(a)+} \gamma^0 u^{(b)} = \delta_{ab}, \quad \bar{v}^{(a)} v^{(b)} = -\delta_{ab},$$

что легко можно проверить для $\vec{p} = 0$, а затем вспомнить, что произведение спиноров вида $\hat{\Psi}_1 \hat{\Psi}_2$ является лоренц-инвариантом.

Таким образом мы построили свободные спинорные волны, которые решают уравнение Дирака без внешних полей.

VI. Лекция. Тензорное произведение операторов, сложные моменты, $3j$ -символы, коэффициенты Клебша-Гордана, шаровые спиноры, точный дискретный спектр уравнения Дирака в потенциале Кулона.

1. На одной из прошлых лекций мы показали лоренц-ковариантность уравнения Дирака, которое можно переписать в форме нестационарного уравнения Шредингера:

$$i \hbar \partial_t \hat{\Psi} = \left(-i c \hbar \hat{\alpha} \vec{\partial} + m c^2 \hat{\beta} \right) \hat{\Psi} \equiv \hat{H} \hat{\Psi},$$

$$\hat{\alpha}_j = (\gamma^0)^{-1} \gamma_j = \gamma^0 \gamma_j, \quad \hat{\beta} = \gamma^0, \quad (\gamma^0)^2 = 1. \quad (149)$$

Лоренц-ковариантность этого уравнения в частности означает, что гамильтониан \hat{H} коммутирует с оператором полного момента $\hat{J}_j = \epsilon_{jkl} \hat{J}_{kl}$, $j = \overline{1, 3}$, где \hat{J}_{jk} — это пространственные компоненты оператора $\hat{J}_{\mu\nu}$, $\mu = \overline{0, 3}$ генерирующего преобразования Лоренца. А именно:

$$[\hat{J}_j, \hat{H}] = 0, \quad \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{\Sigma}}, \quad \hat{\Sigma}_j = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_j/2 & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}_j/2 \end{pmatrix}. \quad (150)$$

Заметим, при этом, что \hat{H} некоммутирует по отдельности с орбитальным моментом и оператором спина:

$$[\hat{L}_j, \hat{H}] \neq 0, \quad [\hat{\Sigma}_j, \hat{H}] \neq 0.$$

Действительно, например,

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = c \hbar \hat{\alpha} [\hat{L}_z, \hat{p}] = i c \hbar (\hat{\alpha}_x \hat{p}_y - \hat{\alpha}_y \hat{p}_x) \neq 0,$$

а также

$$[\hat{\Sigma}_z, \hat{H}] = c \hbar [\hat{\Sigma}_z, \hat{\alpha}] \hat{p} = i c \hbar (\hat{\alpha}_y \hat{p}_x - \hat{\alpha}_x \hat{p}_y) \neq 0,$$

$$\hat{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\vec{\sigma}} \\ \hat{\vec{\sigma}} & 0 \end{pmatrix}.$$

Но, как можно видеть, вклады в этих двух выражений друг друга компенсируют, если взять суммарный момент. Фактически эти наблюдения означают, что у релятивистской частицы сохраняются не спин

$\hat{\Sigma}$ и орбитальный момент \hat{L} по отдельности, а полный момент \hat{J} — их сумма. Этот факт мы неявно подразумевали на прошлых лекциях.

Все три оператора \hat{J}_j , \hat{L}_j и $\hat{\Sigma}_j$ задают представления (реализации) одной и той же алгебры $so(3)$:

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i \epsilon_{jkl} \hat{J}_l.$$

Наша задача теперь увидеть как представления полного момента \hat{J} строятся из представлений для орбитального \hat{L}_j и для спина $\hat{\Sigma}_j$. Подобное мы уже делали в прошлом семестре, когда рассматривали систему двух частиц со спином $1/2$ в случае $\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$. А именно мы разбили произведения состояний для отдельных спинов в суммарном моменте $|\pm\rangle |\pm\rangle$ на два класса:

- симметричные состояния с полным спином $S = 1$:

$$|+\rangle |+\rangle, \quad M = 1,$$

$$|-\rangle |-\rangle, \quad M = -1,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle |-\rangle + |-\rangle |+\rangle], \quad M = 0,$$

- антисимметричные состояния с полным спином $S = 0$:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle].$$

Напомним, что для того, чтобы определить полный спин S и его проекцию на ось z , то есть M , для данного состояния, мы действовали на него операторами:

$$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2, \quad \hat{S}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}.$$

При этом мы предполагали, что \hat{s}_1 всегда действует на первый множитель в произведении $|\pm\rangle |\pm\rangle$, а \hat{s}_2 — на второй. Строго говоря такая операция не является математически корректной, так как операторы $\hat{s}_{1,2} \equiv \hat{\sigma}/2$ действуют в двумерном пространстве Гильберта, тогда как векторы $|\pm\rangle |\pm\rangle$ из тензорного произведения двух состояний лежат в четырехмерном векторном пространстве.

Формально математически в такой ситуации надо действовать следующим образом. Пусть имеется состояние для двух независимых

частиц со спином $1/2$. Запишем его как $\chi_{s1} \chi_{s2}$, где каждый из двух-компонентных спиноров имеет вид $\chi_s = a|+\rangle + b|-\rangle = (a, b)^T$. Тогда \hat{s}_1 действует на такой вектор, как тензорное произведение следующего вида:

$$\hat{s} \otimes \hat{\mathbf{1}} \chi_{s1} \chi_{s2} = \left(\hat{s} \chi_{s1} \right) \left(\hat{\mathbf{1}} \chi_{s2} \right) = \left(\hat{s} \chi_{s1} \right) \chi_{s2}.$$

Это то, что мы раньше обозначали как $\hat{s}_1 \chi_{s1} \chi_{s2}$. Аналогично \hat{s}_2 действует как:

$$\hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{s} \chi_{s1} \chi_{s2} = \chi_{s1} \left(\hat{s} \chi_{s2} \right),$$

что раньше обозначалось как $\hat{s}_2 \chi_{s1} \chi_{s2}$. Здесь тензорное произведение двух 2×2 матриц, например,

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix},$$

определяется как

$$\hat{A} \otimes \hat{B} \equiv \begin{pmatrix} a_{11} \hat{B} & a_{12} \hat{B} \\ a_{21} \hat{B} & a_{22} \hat{B} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a_{11} b_{11} & a_{11} b_{12} & a_{12} b_{11} & a_{12} b_{12} \\ a_{11} b_{21} & a_{11} b_{22} & a_{12} b_{21} & a_{12} b_{22} \\ a_{21} b_{11} & a_{21} b_{12} & a_{22} b_{11} & a_{22} b_{12} \\ a_{21} b_{21} & a_{21} b_{22} & a_{22} b_{21} & a_{22} b_{22} \end{pmatrix}.$$

Отметим два полезных свойства тензорного произведения:

- $\text{tr} \hat{A} \otimes \hat{B} = (\text{tr} \hat{A}) (\text{tr} \hat{B})$
- $(\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_1) (\hat{A}_2 \otimes \hat{B}_2) = (\hat{A}_1 \hat{A}_2) \otimes (\hat{B}_1 \hat{B}_2).$

Наконец заметим, что скалярное произведение (\hat{s}_1, \hat{s}_2) действует на тензорное произведение векторов как:

$$\hat{s} \otimes \hat{s} = \hat{s}_x \otimes \hat{s}_x + \hat{s}_y \otimes \hat{s}_y + \hat{s}_z \otimes \hat{s}_z.$$

Таким образом, обобщение всех этих наблюдений на рассмотренный в начале этой лекции случай имеет вид:

$$\hat{J} = \hat{L} \otimes \hat{\mathbf{1}} + \hat{\mathbf{1}} \otimes \hat{\Sigma},$$

где единица, стоящая слева от знака тензорного произведения \otimes , — это единичный оператор в функциональном пространстве, а единица, стоящая справа, — это единичная 4×4 матрица, то есть тождественный оператор в пространстве релятивистских спинов.

Далее, как, впрочем, и до сих пор, для упрощения формул мы будем писать все выражения без знака тензорного произведения, подразумевая его. Знак тензорного произведения будет выписываться только в тех случаях, когда может возникнуть путаница.

2. Итак, нам нужно научиться складывать моменты в квантовой механике. Это могут быть моменты двух частиц или два момента (например, спин и орбитальный) одной частицы. Сложение моментов в квантовой механике — это поиск собственных состояний для оператора суммарного момента в виде произведения собственных состояний операторов входящих в сумму.

Для общности рассмотрим систему из двух не взаимодействующих частиц с полными моментами \hat{j}_1 и \hat{j}_2 . Эта ситуация включает также и конкретно интересный нам здесь случай одной частицы, момент которой является суммой $\hat{j}_1 = \hat{L}$ и $\hat{j}_2 = \hat{S}$. Оператор полного момента всей системы обеих частиц имеет вид:

$$\hat{J} = \hat{j} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{j} \rightarrow \hat{j}_1 + \hat{j}_2,$$

где \hat{j}_1 и \hat{j}_2 (как и \hat{J}) задаются вообще говоря разными представлениями одной и той же алгебры $so(3)$, в зависимости от того чему равен полный момент каждой из частиц по отдельности. То есть оператор \hat{j} в тензорном произведении $\hat{j} \otimes \hat{1}$ действует, например, в $(2j_1 + 1)$ -мерном представлении, тогда как тот же оператор \hat{j} в тензорном произведении $\hat{1} \otimes \hat{j}$ может действовать в другом $(2j_2 + 1)$ -мерном представлении.

Как мы знаем, векторы в представлении алгебры $so(3)$ можно охарактеризовать двумя числами: значением полного момента J и его проекцией на ось квантования M . А опыт с двумя нерелятивистскими спинами $1/2$ говорит о том, что соответствующее состояние полного момента $|J, M\rangle$ можно разложить по (тензорному) произведению собственных состояний операторов \hat{j}_1 и \hat{j}_2 :

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |J, M\rangle &= J(J+1) |J, M\rangle, & \hat{J}_z |J, M\rangle &= M |J, M\rangle, \\ |J, M\rangle &= \sum_{m_1, m_2} a_{m_1 m_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \end{aligned} \quad (151)$$

где

$$\begin{aligned}\hat{J}_{1,2}^2 |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle &= j_{1,2} (j_{1,2} + 1) |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle, \\ \hat{J}_{1,2z} |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle &= m_{1,2} |j_{1,2}, m_{1,2}\rangle.\end{aligned}$$

Поскольку разложенный вектор $|J, M\rangle$ является собственным для оператора \hat{J}_z с числом M , то

$$\begin{aligned}M |J, M\rangle &= \hat{J}_z |J, M\rangle = \left(\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}\right) \sum_{m_1, m_2} a_{m_1 m_2} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \\ &= \sum_{m_1, m_2} a_{m_1 m_2} (m_1 + m_2) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle.\end{aligned}$$

Чтобы самая правая сторона этой цепочки равенств равнялась ее самой левой стороне, необходимо выполнение равенства $m_1 + m_2 = M$ в каждом члене суммы справа.

Далее, зная как устроено представление $|J, M\rangle$ алгебры $so(3)$, нетрудно понять, что

$$J = \max(M) = \max(m_1 + m_2) = \max(m_1) + \max(m_2) = j_1 + j_2.$$

Имеется единственное состояние с такой суммарной проекцией:

$$|J, J\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle. \quad (152)$$

значения J и M для этого вектора можно найти, подействовав на него операторами \hat{J}^2 и $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ и увидеть, что $J = j_1 + j_2$ и $M = J$.

Начиная с такого состояния (так называемого вектора старшего веса), можно получить остальные векторы в данном представлении, действуя на него многократно оператором понижения. Действительно, как мы знаем с прошлого семестра

$$\hat{J}_- |J, M\rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)} |J, M-1\rangle.$$

В рассматриваемом случае применение этой формулы для случая $M = J$ и (152) дает:

$$\sqrt{2J} |J, J-1\rangle = \hat{J}_- |J, J\rangle \equiv$$

$$\begin{aligned}
&\equiv \left(\hat{j}_- |j_1, j_1\rangle \right) |j_2, j_2\rangle + |j_1, j_1\rangle \left(\hat{j}_- |j_2, j_2\rangle \right) = \\
&= \sqrt{2j_1} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{2j_2} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle,
\end{aligned}$$

где мы использовали (152). Сравнивая самую левую сторону этой цепочки тождественных преобразований с самой правой, получаем пример соотношения (151):

$$\begin{aligned}
|J, J - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \\
&+ \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle, \tag{153}
\end{aligned}$$

где мы использовали, что $J = j_1 + j_2$.

Далее, есть состояние, которое ортогонально данному:

$$\begin{aligned}
|\tilde{J}, \tilde{M}\rangle &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \\
&- \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \tag{154}
\end{aligned}$$

Оно не получается как результат действия понижающего оператора \hat{J}_- на состояние $|J, J\rangle$, то есть не лежит среди векторов $\hat{J}_-^n |J, J\rangle$ в соответствующем представлении. Однако, как следует из его вида, оно лежит в тензорном произведении обсуждаемых представлений, отвечающих операторам \hat{j}_1 и \hat{j}_2 .

Чтобы определить в каком именно представлении полного момента \hat{J} лежит состояние (154), надо подействовать на него оператором $\hat{J}^2 \equiv (\hat{j}_1 + \hat{j}_2)^2$. А для того, чтобы определить \tilde{M} надо очевидно подействовать $\hat{J}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$. В результате получим, что оно отвечает полному моменту равному $J - 1$, а не J , и наибольшему значению проекции для данного полного момента: то есть $|\tilde{J}, \tilde{M}\rangle \equiv |J - 1, J - 1\rangle$. Это старшее состояние в другом представлении алгебры $so(3)$, отличном от представления постороенного по $|J, J\rangle$.

Действуя на состояния (153) и (154) понижающим оператором, мы получаем два новых состояния:

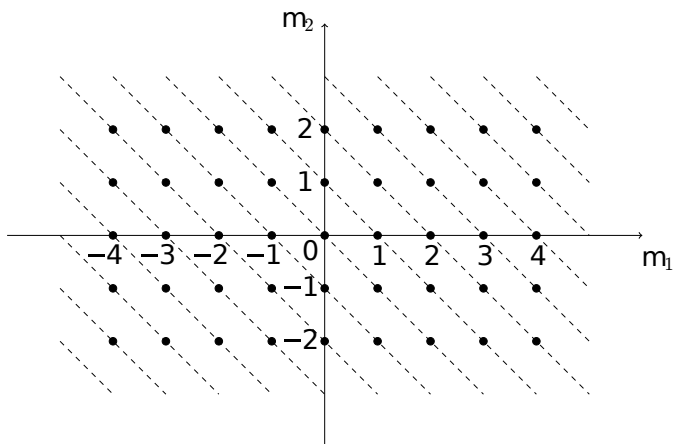


Рис. 14:

$$\hat{J}_-^2 |J, J\rangle \sim |J, J-2\rangle, \quad \hat{J}_- |J-1, J-1\rangle \sim |J-1, J-2\rangle.$$

Они тоже представляются в виде суммы (151) с $m_1 + m_2 = J - 2$, и каждое отвечает своему полному моменту $-J$ и $J - 1$, соответственно.

Однако если $J - 1 > 0$, то наряду с этими двумя состояниями можно построить третье, которое ортогонально им и линейно от них не зависит. Оно отвечает уже полному моменту $J - 2$, а не J и $J - 1$. И является состоянием старшего веса в соответствующем представлении оператора полного момента.

Продолжая эту процедуру, мы увидим, что новые ортогональные и линейно независимые состояния возникают до тех пор пока проекция M не понизится до значения $M = |j_1 - j_2|$. Для наглядности мы изобразили на рис. 14 ситуацию, отвечающую $j_1 = 4$ и $j_2 = 2$. Точки на нем отвечают суммарной проекции M , пунктирные линии отвечают условию $m_1 + m_2 = \text{const}$, как в сумме (151). Видно, что при $M = |j_1 - j_2|$ количество точек на линиях $m_1 + m_2 = \text{const}$ перестает меняться.

Таким образом, мы получаем так называемое неравенство треугольника:

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2,$$

которое ограничивает значения суммарного момента для данных зна-

чений каждого момента в сумме. В обсуждаемой ситуации полное количество состояний равно:

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{J=j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1),$$

как и должно быть.

В общей ситуации уравнение (151) можно записать в виде:

$$|J, M\rangle = (-1)^{j_1-j_2+M} \sqrt{2J+1} \times \\ \times \sum_{m_1+m_2=M} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \quad (155)$$

где мы обозначили как

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

— так называемые $3j$ -символы, которые мы явно вычислили выше в некоторых конкретных ситуациях. Коэффициенты в разложении (151) очевидно выражаются через эти символы:

$$\langle j_1, m_1 | \langle j_2, m_2 | |J, M\rangle = \\ = (-1)^{j_1-j_2+M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \equiv a_{m_1 m_2}. \quad (156)$$

В теории групп $a_{m_1 m_2}$ называются коэффициентами Клебша–Гордана.

Из последнего соотношения не трудно увидеть, что

$$(-1)^{j_1-j_2+M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = \\ = \int d^2\Omega Y_{j_1 m_1}(\Omega) Y_{j_2 m_2}(\Omega) Y_{JM}^*(\Omega),$$

где $Y_{l,m}(\Omega)$ — это сферические гармоники. Чтобы получить это соотношение надо вставить в (156) единичный оператор в виде:

$$\int d^2\Omega |\Omega\rangle \langle \Omega| = \hat{\mathbf{1}}, \quad (157)$$

и учесть, что кет-вектор $|\Omega\rangle$ лежит в тензорном произведении $(2j_1 + 1)$ - и $(2j_2 + 1)$ -мерных векторных пространств, а бра-вектор $\langle\Omega|$ — в $(2J + 1)$ -мерном.

3. Применим теперь эти знания непосредственно для случая, который обсуждался в самом начале лекции. А именно, когда $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$. В частности это позволит записать угловую зависимость волновой функции релятивистской частицы со спином $1/2$ в состояниях с орбитальным моментом l , когда задано значение полного момента J и его проекции M . Итак, в данном случае $j_1 = l$ и $j_2 = 1/2$.

Из общей формулы (155) следует, что

$$\langle\theta, \varphi|J, M\rangle = (-1)^{l-1/2+M} \sqrt{2J+1} \times \\ \times \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & 1/2 & J \\ M-\sigma & \sigma & -M \end{pmatrix} Y_{l, M-\sigma}(\theta, \varphi) \chi_{\sigma}, \quad (158)$$

где $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — это сферические гармоники, а χ_{σ} — двухкомпонентные спиноры:

$$\chi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Используя табличные значения для $3j$ -символов, из (158) можно получить так называемые шаровые спиноры:

$$\hat{Y}_{l+1/2, l, M}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+1/2+M}{2l+1}} Y_{l, M-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l+1/2-M}{2l+1}} Y_{l, M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (159)$$

и

$$\hat{Y}_{l-1/2, l, M}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{l+1/2-M}{2l+3}} Y_{l, M-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{\frac{l+1/2+M}{2l+3}} Y_{l, M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (160)$$

Оставляем это в качестве упражнения. Заметим, что в данном случае мы имеем два варианта для значений полного момента $J = l \pm 1/2$. Соответственно, при данном l возникают два набора спиноров индексированных M . В данных выражениях $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ — это обычные сферические гармоники, но у них полуцелые проекции момента M , как

и должно быть для спиноров, ведь $e^{i(M\pm 1/2)(\varphi+2\pi)} = -e^{i(M\pm 1/2)\varphi}$, а спинор и должен менять знак при повороте на полный угол, как мы знаем с прошлого семестра.

Можно показать, что

$$\int d^2\Omega \hat{Y}_{J,l,M}^+ \hat{Y}_{J',l',M'} = \delta_{JJ'} \delta_{ll'} \delta_{MM'},$$

что аналогично ситуации с обычными сферическими гармониками. Эти знания мы можем применить для поиска точных решений уравнения Дирака в поле Кулона.

4. Уравнение Дирака во внешних электромагнитных полях можно сформулировать аналогично тому, как мы это сделали для уравнения ШФКГ на одной из предыдущих лекций. А именно, необходимо удлинить (ковариантизировать) производную:

$$\left[i\hbar \gamma^\mu D_\mu - mc \right] \hat{\Psi}(\underline{x}) = 0, \quad D_\mu \equiv \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu. \quad (161)$$

Аналогично тому, как это было сделано на одной из прошлых лекций, можно показать, что это уравнение ковариантно при калибровочных преобразованиях:

$$A_\mu(\underline{x}) \rightarrow A_\mu(\underline{x}) - \partial_\mu \beta(\underline{x}), \quad \hat{\Psi}(\underline{x}) \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c} \beta(\underline{x})} \hat{\Psi}(\underline{x}).$$

В поле Кулона, $A_0(r) = \frac{Ze}{r}$ и $\vec{A} = 0$, сделав подстановку

$$\hat{\Psi}(\underline{x}) = e^{\frac{iEt}{\hbar}} \hat{\psi}(\vec{x}),$$

для состояний с определенной энергией, уравнение (161) можно записать в виде аналогичном стационарному уравнению Шредингера:

$$\left(-i\hat{\alpha}\vec{\partial} + \frac{mc}{\hbar} \gamma^0 - \frac{Z\alpha_0}{r} \right) \hat{\psi}(\vec{x}) = \frac{E}{\hbar c} \hat{\psi}(\vec{x}), \quad (162)$$

где $\alpha_0 = e^2/\hbar c$ — так называемая постоянная тонкой структуры (не путать с $\hat{\alpha}$). Очевидно, что гамильтониан в последнем уравнении коммутирует с полным моментом, так как потенциал является сферически симметричным.

Чтобы найти решения уравнения (162), нам необходимо построить четырехкомпонентные спиноры $\hat{\psi}(\vec{x})$ с использованием двухкомпонентных шаровых спиноров (159), (160). Действительно, в силу

сферической симметрии потенциала $Z \alpha_0/r$ полный момент сохраняется и мы можем действовать, как в прошлом семестре. А именно, можно использовать разделение переменных.

Однако оператор $\hat{\alpha} \vec{\partial}$ действует нетривиальным образом на шаровые спиноры. Поэтому, чтобы двигаться дальше, заметим, что верны следующие коммутационные соотношения:

$$\left[\hat{J}, \left(\hat{\sigma}, \vec{\partial} \right) \right] = \left[\hat{J}, \left(\hat{\sigma}, \vec{n} \right) \right] = 0, \quad \vec{n} = \frac{\vec{r}}{r},$$

одно из которых фактически обсуждалось в самом начале этой лекции. Поэтому спиноры

$$\left(\hat{\sigma}, \vec{\partial} \right) \hat{Y}_{JM}, \quad \left(\hat{\sigma}, \vec{n} \right) \hat{Y}_{JM}, \quad (163)$$

имеют те же значения J и M , что и \hat{Y}_{JM} . Однако орбитальные моменты у них отличаются от l , так как четность новых спиноров относительно инверсии, $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$, отличается от четности исходного спинора \hat{Y}_{JM} . Действительно, вспомним из прошлого семестра, что при инверсии сферические гармоники умножаются на $(-1)^l$. При этом, при инверсии $\vec{\partial} \rightarrow -\vec{\partial}$ и $\vec{n} \rightarrow -\vec{n}$.

Так как в рассматриваемой ситуации при заданном значении J для l имеется всего две возможности, $l = J \pm 1/2$, которые отличны на единицу, то нетрудно понять, что два спинора (163) должны быть пропорциональны друг другу. Действительно, можно показать, что

$$\left(\hat{\sigma}, \vec{\partial} \right) \hat{Y}_{JM} = - \left[J(J+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \frac{\left(\hat{\sigma}, \vec{n} \right)}{r} \hat{Y}_{JM}. \quad (164)$$

Для этого надо воспользоваться тем, что

$$\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{s}^2 = 2 \left(\hat{L}, \hat{s} \right) = \left(\hat{L}, \hat{\sigma} \right),$$

а $J(J+1)$, $l(l+1)$ и $3/4$ являются собственными числами операторов \hat{J}^2 , \hat{L}^2 и \hat{s}^2 , соответственно. Теперь, чтобы убедиться в верности равенства (164) нужно умножить обе его стороны слева на $\left(\hat{\sigma}, \vec{n} \right)$ и воспользоваться знакомым нам свойством матриц Паули: $\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}} + i \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l$. Оставляем это в качестве упражнения.

Соотношение (164) позволяет угадать удобный анзац для четырехкомпонентного спинора, который решает уравнение Дирака в поле Кулона¹⁸ (162):

$$\hat{\psi}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} f(r) \hat{Y}_{JM}(\theta, \varphi) \\ -i g(r) \left(\hat{\vec{\sigma}}, \vec{n} \right) \hat{Y}_{JM}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (165)$$

где $f(r)$ и $g(r)$ — это релятивистские варианты радиальной волновой функции $R(r)$, которая возникала в нерелятивистском случае в прошлом семестре. То есть теперь нам остается найти $f(r)$ и $g(r)$. Подставляя (165) в (162) и используя найденное соотношение (164), находим уравнения, которым должны удовлетворять $f(r)$ и $g(r)$:

$$\begin{aligned} f' + \frac{1 + \kappa}{r} f - \left(\frac{m c}{\hbar} + \frac{E}{\hbar c} + \frac{Z \alpha_0}{r} \right) g &= 0, \\ g' + \frac{1 - \kappa}{r} g - \left(\frac{m c}{\hbar} - \frac{E}{\hbar c} - \frac{Z \alpha_0}{r} \right) f &= 0. \end{aligned} \quad (166)$$

Здесь штрихи над $f(r)$ и $g(r)$ — это производные по r и мы здесь записали в виде одной системы уравнений две, отвечающие двум значениям l для данного полного момента J :

$$\kappa = \begin{cases} -(J + \frac{1}{2}) = -(l + 1), & J = l + \frac{1}{2} \\ J + \frac{1}{2} = l, & J = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (167)$$

Исследуем поведение решений системы (166) при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$, как мы это делали в нерелятивистском случае. При $r \rightarrow 0$ эта система переходит в:

$$\begin{aligned} r f' + (1 + \kappa) f - Z \alpha_0 g &\approx 0, \\ r g' + (1 - \kappa) g + Z \alpha_0 f &\approx 0. \end{aligned} \quad (168)$$

Это однородные по r уравнения. Поэтому их решения мы будем искать в виде:

¹⁸ Действительно, заметим, что уравнение Дирака (162) содержит оператор $(\hat{\vec{\alpha}}, \vec{\partial})$, который перемешивает двухкомпонентный шаровой спинор \hat{Y} с двухкомпонентным же шаровым спинором $(\hat{\vec{\sigma}}, \vec{\partial})$ $\hat{Y} \sim (\hat{\vec{\sigma}}, \vec{n}) \hat{Y}$.

$$f \approx a_0 r^\gamma, \quad g \approx b_0 r^\gamma,$$

что, после подстановки в (168), дает:

$$\begin{pmatrix} \gamma + 1 + \kappa & -Z \alpha_0 \\ Z \alpha_0 & \gamma + 1 - \kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = 0. \quad (169)$$

Для существования нормируемого решения необходимо и достаточно, чтобы

$$\gamma = -1 + \sqrt{\kappa^2 - (Z \alpha_0)^2}. \quad (170)$$

При таком значении γ моды правильно ведут себя в пределе $r \rightarrow 0$ для того, чтобы сходился нормировочный интеграл от $\hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}$. Соответствующий вектор из коэффициентов a_0 и b_0 (с точностью до множителя) равен:

$$a_0 = Z \alpha_0, \quad b_0 = \kappa + \sqrt{\kappa^2 - (Z \alpha_0)^2}. \quad (171)$$

В то же самое время, при $r \rightarrow \infty$ система (166) упрощается до:

$$\begin{aligned} f' - \left(\frac{m c}{\hbar} + \frac{E}{\hbar c} \right) g &\approx 0, \\ g' - \left(\frac{m c}{\hbar} - \frac{E}{\hbar c} \right) f &\approx 0. \end{aligned} \quad (172)$$

Мы здесь интересуемся лишь дискретным спектром, то есть $E < m c^2$. В таком случае из (172) находим, что

$$f \sim e^{-\lambda r}, \quad g \sim e^{-\lambda r}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{\hbar c}. \quad (173)$$

Теперь, аналогично нерелятивистскому случаю, зная поведение f и g при $r \rightarrow 0$ и $r \rightarrow \infty$, эти функции будем искать в виде:

$$f(r) = e^{-\lambda r} r^\gamma \sum_{s=0}^{\infty} a_s r^s, \quad g(r) = e^{-\lambda r} r^\gamma \sum_{s=0}^{\infty} b_s r^s, \quad (174)$$

где λ , γ , a_0 и b_0 определены выше.

Подставляя (174) в систему (166) и приравнявая к нулю по отдельности коэффициенты при каждой степени r , получаем рекуррентные соотношения вида:

$$\hat{A}_s \vec{u}_{s+1} = \hat{B} \vec{u}_s, \quad s = 0, 1, \dots, \quad (175)$$

где

$$\vec{u}_s = \begin{pmatrix} a_s \\ b_s \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_0 = \begin{pmatrix} a_0 \\ b_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z \alpha_0 \\ \kappa + \sqrt{\kappa^2 - (Z \alpha_0)^2} \end{pmatrix} \quad (176)$$

и

$$\hat{A}_s = \begin{pmatrix} 1 + b_0 + s & -a_0 \\ a_0 & 1 + b_0 - 2\kappa + s \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \lambda & \frac{m c^2 + E}{\hbar c} \\ \frac{m c^2 - E}{\hbar c} & \lambda \end{pmatrix} \quad (177)$$

Заметим, что первое соотношение в рекурсии (175) (для $s = 0$), связывает лишь коэффициенты a_0 и b_0 между собой, и выполняется тождественно.

Так как

$$\det \hat{A}_s = (1 + s) \left(1 + s + 2 \sqrt{\kappa^2 - (Z \alpha_0)^2} \right) \neq 0, \quad (178)$$

то рекуррентное соотношение (175) можно переписать в виде:

$$\vec{u}_{s+1} = \hat{A}_s^{-1} \hat{B} \vec{u}_s, \quad (179)$$

где

$$\hat{A}_s^{-1} = \frac{1}{\det \hat{A}_s} \begin{pmatrix} 1 + b_0 - 2\kappa + s & a_0 \\ -a_0 & 1 + b_0 + s \end{pmatrix}. \quad (180)$$

Собственные числа матрицы \hat{B} равны нулю и 2λ . Обозначим соответствующие собственные векторы как \vec{v}_1 и \vec{v}_2 :

$$\hat{B} \vec{v}_1 = 0, \quad \hat{B} \vec{v}_2 = 2 \lambda \vec{v}_2, \\ \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{m c^2 + E}{\hbar c}} \\ -\sqrt{\frac{m c^2 - E}{\hbar c}} \end{pmatrix}, \quad \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{m c^2 + E}{\hbar c}} \\ \sqrt{\frac{m c^2 - E}{\hbar c}} \end{pmatrix}. \quad (181)$$

Согласно (178) и (180) при $s \rightarrow \infty$:

$$\hat{A}_s^{-1} \sim \frac{1}{s}. \quad (182)$$

Поэтому, если ряды (174) не обрываются, то при больших s

$$\vec{u}_s \approx p \vec{v}_1 + q \vec{v}_2, \quad (183)$$

где p и $q \neq 0$ — это некоторые числа. В таком случае из (174) и (179), (181), (182) и суммирования рядов следует, что при $r \rightarrow \infty$:

$$f \sim e^{+\lambda r}, \quad g \sim e^{+\lambda r},$$

что недопустимо, так как приводит к неперенормируемой волновой функции. Поэтому ряды в (174) должны обрываться. Ситуация опять же аналогична нерелятивистскому случаю.

Один из способов добиться того, чтобы ряды в (174) обрывались — это потребовать выполнения соотношения:

$$\hat{A}_s^{-1} \vec{v}_2 = t \vec{v}_1, \quad (184)$$

при некотором s . Здесь t — это некоторое число. Заметим, что последнее уравнение можно переписать в форме:

$$\hat{B} \hat{A}_s^{-1} \vec{v}_2 = 0, \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (185)$$

Действительно, для вектора (183) мы имеем:

$$\hat{B} \vec{u}_s = 2 \lambda q \vec{v}_2.$$

Если же теперь верно (184), то вследствие (181) мы получаем, что $\vec{u}_{s+2} = 0$ и ряды в (174) обрываются. То есть в таком случае в (174)

возникают полиномы, а не формальные ряды. И спиноры $\hat{\psi}(\vec{x})$ оказываются нормированными.

Другая возможность добиться того, чтобы ряды в (174) обрывались может быть реализована при $\kappa < 0$, где κ определен в (167). Действительно, если

$$\vec{u}_0 = t \vec{v}_1 \quad (186)$$

для некоторого числа t , то компоненты вектора $\vec{u}_0 = (a_0, b_0)$ имеют разные знаки. Так может быть при $\kappa < 0$, как следует из (171). Уравнение (186) может быть удовлетворено подбором t и E . Иными словами, соотношения

$$\hat{B} \vec{u}_0 = 0, \quad \kappa < 0, \quad (187)$$

и (185) являются условиями квантования энергии. Так как матрица \hat{B} вырождена, то уравнения (185) и (187) содержат лишь по одному независимому алгебраическому соотношению.

Совокупность всех решений условий (185) и (187) приводит к следующему спектру энергий:

$$E_{J, n_r} = m c^2 \left[1 + \frac{(Z \alpha_0)^2}{\left(n_r + \sqrt{(J + \frac{1}{2})^2 - (Z \alpha_0)^2} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}},$$

$$n_r = \begin{cases} 0, 1, 2, \dots & J = l + \frac{1}{2} \\ 1, 2, \dots & J = l - \frac{1}{2} \end{cases}. \quad (188)$$

При получении этого спектра было использовано соотношение (167), определяющее κ .

Как следует из последней формулы, энергия основного состояния (при $l = 0$, $J = 1/2$, $n_r = 0$) имеет вид:

$$E_0 = m c^2 \sqrt{1 - (Z \alpha_0)^2}. \quad (189)$$

Полученные выражения являются точными решениями уравнения Дирака. То есть они верны при всех значениях¹⁹ $Z \alpha_0 < 1$. Однако, заметим, что спектр (188) хотя и найден при точном решении уравнения Дирака, но вычислен с превышением точности, так как поправки

¹⁹Что происходит при $Z \alpha_0 \geq 1$ — это отдельный важный вопрос. Оказывается

из квантовой теории поля тоже имеют вид разложения по степеням $(Z \alpha_0)^n$.

Поскольку $\alpha_0 \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$, то при малом заряде ядра Z можно разложить (188) по степеням $(Z \alpha_0)^n$:

$$E \approx m c^2 - \frac{(Z \alpha_0)^2 m c^2}{2 n^2} \left\{ 1 + \frac{(Z \alpha_0)^2}{n} \left[\frac{1}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4 n} \right] \right\} + \dots,$$

$$n = n_r + J + \frac{1}{2} = 1, 2, 3, \dots \quad (190)$$

На следующих лекциях мы получим это выражение применяя теорию возмущений к релятивистским поправкам.

Наконец заметим, что из (167) следует, что $|\kappa| = J + 1/2$. Поэтому согласно (188) имеется двукратное вырождение уровней энергии, помимо вырождения по M . То есть энергии уровней с $l = J \pm 1/2$ совпадают, что является точным результатом. Таким образом, получается, что вырождение в релятивистском случае меньше, чем в нерелятивистском. Мы вернемся к этому вопросу на одной из последующих лекций.

при таких значениях заряда ядра его поле пробивает вакуум квантовой теории поля: грубо говоря выбивает электроны из моря Дирака. Это приводит к рождению заряженных пар за счет энергии поля и уменьшения заряда ядра. Но эта тема далеко выходит за рамки нашего курса.

VII. Лекция. *Стационарная теория возмущений для невырожденного и вырожденного дискретных спектров, теория возмущений для близких уровней энергии, применение стационарной теории возмущений для вычисления поправок к спектру энергий атома гелия, ортосостояние и парасостояние, приближения Хартри и Хартри–Фока.*

1. Точно решаемых задач в любой теории очень мало. В частности, их мало и в классической, и в квантовой механике. Поэтому важную роль играют приближенные методы. В квантовой механике они используются для поиска решений уравнения Шредингера. Один из таких методов — это квазиклассическое приближение, с которым мы познакомились еще в прошлом семестре. Другой метод — это теория возмущений, которому посвящены несколько следующих лекций.

Суть теории возмущений в том, что полный гамильтониан системы можно разбить на два вклада

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (191)$$

где \hat{H}_0 — часть полного гамильтониана, описывающая задачу, решение которой точно известно, а \hat{V} называется возмущением. Например, в качестве \hat{H}_0 можно выбрать одну из тех задач, что мы уже умеем точно решать еще с прошлого семестра:

- $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ — свободная частица;
- $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m + m\omega^2 \hat{x}^2/2$ — осциллятор;
- $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m - Ze^2/|\hat{x}|$ — водородоподобный атом.

Выбор \hat{H}_0 зависит от конкретной задачи. Всю остальную часть полного гамильтониана (191) можно отнести к возмущению \hat{V} . Различаются стационарная теория возмущений, когда все вклады в полный гамильтониан \hat{H} не зависят от времени, и нестационарная, в ином случае.

Начнем мы наше общее обсуждение со стационарной ситуации. В таком случае необходимо искать спектр энергий и соответствующие векторы состояний:

$$[\hat{H} - E] |\psi\rangle \equiv [\hat{H}_0 + \lambda \hat{V} - E] |\psi\rangle = 0, \quad (192)$$

где мы явно выделили из возмущения малый параметр λ . Это позволит нам наглядно разделить различные степени приближения.

Рассмотрим сначала ситуацию, когда у невозмущенного гамильтониана дискретный и невырожденный спектр:

$$\hat{H}_0 \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle. \quad (193)$$

Разложим собственные функции и собственные энергии полного гамильтониана по степеням λ :

$$\begin{aligned} \left| \psi \right\rangle &= \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots \\ E_n &= E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (194)$$

Тогда уравнение (192) примет вид:

$$\begin{aligned} & \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \right) \left(\left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots \right) = \\ & = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \right) \left(\left| \psi_n^{(0)} \right\rangle + \lambda \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + \lambda^2 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle + \dots \right) \end{aligned} \quad (195)$$

Приравнивая коэффициенты при различных степенях λ слева и справа этого соотношения, мы получим уравнение (193) в порядке λ^0 , соотношение

$$\hat{H}_0 \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle - E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle - E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = -\hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (196)$$

в порядке λ^1 , и равенство

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle - E_n^{(0)} \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle - E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle - E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \\ = -\hat{V} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle, \end{aligned} \quad (197)$$

в порядке λ^2 и так далее.

Разложим теперь поправки по собственным функциям невозмущенного гамильтониана:

$$\begin{aligned} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle &\equiv \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)} \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle, \\ \left| \psi_n^{(2)} \right\rangle &\equiv \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(2)} \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle, \end{aligned} \quad (198)$$

здесь в каждом из выражений берется одна сумма по всем m не равным n , где n — это номер того уровня, поправку к которому мы считаем.

Подставив эти разложения в (196) и (197) и используя (193), получим:

$$\sum_{m \neq n} C_{nm}^{(1)} \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle - E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = -\hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \quad (199)$$

и

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq n} C_{nm}^{(2)} \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle - E_n^{(2)} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle = \\ = -\hat{V} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle + E_n^{(1)} \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle. \end{aligned} \quad (200)$$

Умножим теперь обе стороны уравнения (199) слева на $\left\langle \psi_n^{(0)} \right|$ и используем свойство ортогональности базиса собственных функций невозмущенного гамильтониана. Тогда получим, что

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \equiv V_{nn}. \quad (201)$$

Видно, что матричные элементы оператора \hat{V} определяют величину отклонения возмущенных уровней энергии от невозмущенных. Далее, умножая обе стороны (199) слева на $\left\langle \psi_k^{(0)} \right|$, получим, что

$$C_{nk}^{(1)} = \frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad (202)$$

где мы ввели обозначение $V_{mn} = \left\langle \psi_m^{(0)} \right| \hat{V} \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle$. Таким образом:

$$\left| \psi_n^{(1)} \right\rangle = - \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \left| \psi_m^{(0)} \right\rangle, \quad (203)$$

Очевидно, что для применимости теории возмущений необходимо, чтобы по крайней мере первая поправка была мала по сравнению с нулевым вкладом:

$$\left\| \left| \psi_n^{(1)} \right\rangle \right\| \ll \left\| \left| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right\|,$$

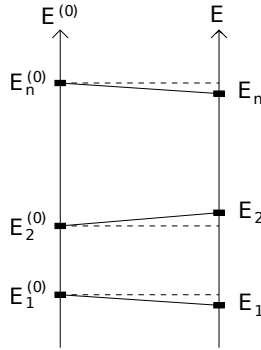


Рис. 15:

то есть, как следует из (198) и (203):

$$\left| C_{mn}^{(1)} \right| \equiv \left| \frac{V_{mn}}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \right| \ll 1, \quad (204)$$

что означает, что расстояние между уровнями $E_m^{(0)} - E_n^{(0)}$ в невозмущенной задаче должно быть достаточно большим по сравнению с соответствующим матричным элементом возмущения \hat{V} , как изображено на рис. 15.

Аналогичным образом, используя (203), из уравнения (200) получаем:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn} V_{nm}^*}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (205)$$

Здесь мы использовали эрмитовость оператора \hat{V} , то есть что $V_{mn}^* = V_{nm}$.

Теперь стоит сделать пару замечаний. Во-первых, из (205) сразу следует, что вторая поправка к основному состоянию $E_0^{(0)}$ всегда меньше нуля, $E_0^{(2)} \leq 0$, так как $E_n^{(0)} > E_0^{(0)}$, для всех $n > 0$.

Во-вторых, как правило ряды теории возмущений (по степеням \hat{V}) являются формальными и расходятся. Поэтому, чтобы найти приближенный ответ для E и $|\psi\rangle$ следует учитывать только первые несколько вкладов в разложении, пока члены ряда малы.

В качестве примера рассмотрим следующий интеграл:

$$Z(a, \lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-a x^2 - \lambda x^4}.$$

Простой заменой переменной интегрирования можно выразить ответ для него через Гамма-функцию. Однако, если рассматривать разложение этого интеграла по степеням λ , считая его малым, то мы получим расходящийся формальный асимптотический ряд.

Действительно, если бы ряд по λ сходиллся, то функция $Z(a, \lambda)$ была бы аналитической в некоторой окрестности нуля в комплексной плоскости λ . А это значит, что интеграл $Z(a, \lambda)$ был бы определен и при отрицательных λ , что очевидно не так, ведь при таких значениях λ он расходится. Заметим, что прямо такая ситуация может возникнуть при вычислении функционального интеграла с неквадратичным потенциалом.

2. До сих пор мы обсуждали применение теории возмущений в случае невырожденного и дискретного спектра. При этом мы предполагали, что выполнено условие (204). То есть под воздействием возмущения уровни энергии смещались слабо, как изображено на рис. 15.

Рассмотрим, теперь, как изменится ситуация в случае, если спектр невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 имеет вырождение. Формулы полученные до сих пор теперь не применимы, потому что критерий (204) нарушается из-за вырождения.

В обсуждаемой ситуации собственные состояния \hat{H}_0 будут характеризоваться некоторым набором квантовых чисел μ , от которого не зависит сам невозмущенный вид спектра энергий:

$$\hat{H}_0 \left| \psi_{n,\mu}^{(0)} \right\rangle = E_n^{(0)} \left| \psi_{n,\mu}^{(0)} \right\rangle, \quad \mu = \overline{1, g}, \quad (206)$$

где g — это степень вырождения.

Выбор состояний $\left| \psi_{n,\alpha}^{(0)} \right\rangle$ неоднозначен, поскольку любая их линейная комбинация

$$\left| \psi_{n,\alpha}^{(0)} \right\rangle = \sum_{\mu=1}^g C_{\alpha\mu} \left| \psi_{n,\mu}^{(0)} \right\rangle, \quad (207)$$

тоже является собственным состоянием гамильтониана \hat{H}_0 с тем же значением $E_n^{(0)}$.

Для применения теории возмущений выбор $|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ должен быть таким, чтобы под действием \hat{V} эти состояния слабо изменялись. Подходящие векторы $|\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ называются правильными состояниями нулевого приближения. Как мы сейчас увидим, они являются собственными для оператора возмущения.

Далее, под воздействием возмущения \hat{V} вырождение спектра может частично или полностью сняться, так как вполне может быть, что $[\hat{V}, \hat{H}_0] \neq 0$. Все зависит от симметрий \hat{V} . Но это и не значит, что спектр обязательно станет полностью невырожденным. Поэтому число возмущенных уровней энергии $E_{n,\alpha}$ может быть и не равно кратности вырождения g .

Итак, обсудим, как работает теория возмущений в рассматриваемой ситуации. Чтобы не путаться в обилии индексов опустим оба индекса у точной энергии уровня:

$$[\hat{H}_0 + \hat{V}] |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle \approx E |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle, \quad (208)$$

где для поиска поправок к энергии в первом приближении мы считаем, что $|\psi\rangle \approx |\psi_{n,\alpha}^{(0)}\rangle$ — это правильные состояния нулевого приближения, относящиеся к $E_n^{(0)}$.

Подставляя в (208) линейную комбинацию (207), получим, что первая итерация теории возмущений:

$$[\hat{H}_0 + \hat{V}] \sum_{\mu} C_{\alpha\mu} |\psi_{n,\mu}^{(0)}\rangle \approx E \sum_{\mu} C_{\alpha\mu} |\psi_{n,\mu}^{(0)}\rangle. \quad (209)$$

Из этого, с учетом (206), следует:

$$\sum_{\mu} C_{\alpha\mu} [\hat{V} |\psi_{n,\mu}^{(0)}\rangle - (E - E_n^{(0)}) |\psi_{n,\mu}^{(0)}\rangle] = 0. \quad (210)$$

Обозначим поправку как $E - E_n^{(0)} = \epsilon$ — это расщепление уровней энергии за счет возмущения, как изображено на рис. 16.

Умножая (210) слева на $\langle \psi_{n,\nu}^{(0)} |$, получаем:

$$\sum_{\mu} [\langle \psi_{n,\nu}^{(0)} | \hat{V} |\psi_{n,\mu}^{(0)}\rangle - \epsilon \delta_{\nu\mu}] C_{\alpha\mu} = 0.$$

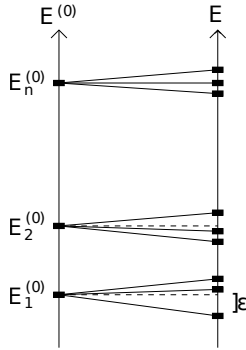


Рис. 16:

— систему линейных алгебраических уравнений на $C_{\alpha\mu}$, которая имеет решения, если

$$\det (V_{\nu\mu} - \epsilon \delta_{\nu\mu}) = 0, \quad V_{\nu\mu} \equiv \langle \psi_{n,\nu}^{(0)} | \hat{V} | \psi_{n,\mu}^{(0)} \rangle. \quad (211)$$

Это уравнение на ϵ , которое называется секулярным или характеристическим. Его порядок равен кратности вырождения уровней энергии g .

Как мы видим, собственные значения матрицы $V_{\nu\mu}$ действительно определяют поправки первого порядка к вырожденным уровням энергии, а собственные векторы этой матрицы определяют коэффициенты в разложении (207), то есть правильные состояния нулевого приближения.

3. Обсудим теперь применение теории возмущений к ситуации с очень близкими уровнями энергии. А именно, пусть уровни \hat{H}_0 невырождены, но тем не менее столь близки, что критерий применимости теории возмущений (204) нарушается. Помимо этого, возмущенные уровни системы могут зависеть от какого-то внешнего поля. И может оказаться, что при некоторых значениях этого поля какие-либо два уровня энергии оказываются очень близки или даже пересекаются. Такие системы часто называются двухуровневыми, поскольку при решении задачи в первом приближении рассматривают только два близких уровня, игнорируя остальные.

Тогда, без учета малых возмущений имеем:

$$\hat{H}_0 | \psi_1^{(0)} \rangle = E_1^{(0)} | \psi_1^{(0)} \rangle, \quad \hat{H}_0 | \psi_2^{(0)} \rangle = E_2^{(0)} | \psi_2^{(0)} \rangle.$$

В обсуждаемой ситуации, также как и в случае вырожденного спектра, решение возмущенной задачи следует искать в виде линейной комбинации:

$$|\psi\rangle = C_1 |\psi_1^{(0)}\rangle + C_2 |\psi_2^{(0)}\rangle.$$

Соответственно получаем следующее уравнение для возмущенной задачи:

$$\begin{aligned} \hat{H} |\psi\rangle &\equiv (\hat{H}_0 + \hat{V}) (C_1 |\psi_1^{(0)}\rangle + C_2 |\psi_2^{(0)}\rangle) = \\ &= E (C_1 |\psi_1^{(0)}\rangle + C_2 |\psi_2^{(0)}\rangle). \end{aligned} \quad (212)$$

Умножая обе стороны этого уравнения слева по очередности на $\langle\psi_1^{(0)}|$ и $\langle\psi_2^{(0)}|$, получаем систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} V_{11} + E_1^{(0)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + E_2^{(0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad (213)$$

где $V_{ij} = \langle\psi_i^{(0)}|\hat{V}|\psi_j^{(0)}\rangle$, $i, j = \overline{1, 2}$.

Полученное соотношение можно рассматривать как уравнение Шредингера в системе со спином. Действительно, матрицу, стоящую с левой стороны в (213) можно записать как:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{eff} &= E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + V_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + V_{21} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + N_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= E_0 \hat{\mathbf{1}} + 2 N_+ \hat{\sigma}_- + 2 N_- \hat{\sigma}_+ + N_z \hat{\sigma}_z, \end{aligned}$$

где

$$E_0 = \frac{1}{2} (V_{11} + V_{22} + E_1^{(0)} + E_2^{(0)}), \quad N_z = \frac{1}{2} (V_{11} - V_{22} + E_1^{(0)} - E_2^{(0)}),$$

и $N_{\pm} = |V_{12}| e^{\pm i\beta}$, с учетом эрмитовости \hat{V} .

В результате мы получаем задачу на поиск собственных чисел и векторов матричного гамильтониана вида:

$$\hat{H}_{eff} = E_0 \hat{\mathbf{1}} + (\vec{N}, \vec{\sigma}),$$

где $\hat{\sigma}$ — это матрицы Паули.

4. Обсудим теперь применение стационарной теории возмущений на примере поиска уровней энергии и волновых функций атома гелия — простейшем примере сложного атома. Гамильтониан для двух электронов, которые отталкиваются друг от друга и притягиваются к очень тяжелому ядру, имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

В случае гелия конечно $Z = 2$, но мы для общности предполагаем Z произвольным. Как и в случае атома водорода, задачу удобно решать в атомных единицах, когда:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (214)$$

где $\Delta_{1,2}$ — это операторы Лапласа действующие на $\vec{r}_{1,2}$. Естественно возмущением считать последний вклад, отвечающий за потенциальную энергию отталкивания электронов друг от друга. Однако, как мы явно увидим далее, это очень грубое приближение, что и не удивительно, ведь обсуждаемый вклад практически такого же порядка, что и энергия притяжения каждого из электронов к ядру. И все же мы в основном будем рассматривать такое грубое приближение, оставляя более точные вычисления в качестве задач.

В нулевом порядке хорошо определены состояния водородоподобного атома. Поэтому полный набор квантовых чисел состоит из

$$n = 1, 2, \dots, \quad l = \overline{0, n-1}, \quad |m| \leq l,$$

для каждого из электронов. Спектр энергий невозмущенной задачи вырожден по l , m и по проекции спина каждого электрона. Напомним, что в нерелятивистском приближении спиновая и координатная части волновой функции разделены.

Спектр энергий невозмущенной задачи имеет вид:

$$E_{n_1, n_2} = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right) = E_{n_1} + E_{n_2}, \quad (215)$$

если восстановить физические единицы, где $a_0 = \hbar^2/m e^2 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ см — радиус боровской орбиты. Как мы знаем с прошлого семестра, для волновых функций имеются следующие варианты. Состояние с полным спином ноль описывается волновой функцией:

$$\psi_{s=0}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) |S = 0\rangle, \quad (216)$$

где

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle \right]. \quad (217)$$

А три состояния с полным спином единица задаются волновыми функциями:

$$\psi_{s=1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) |S = 1, M_s\rangle, \quad (218)$$

где

$$\begin{aligned} |S = 1, M_s = -1\rangle &= |-\rangle |-\rangle, \\ |S = 1, M_s = 1\rangle &= |+\rangle |+\rangle, \\ |S = 1, M_s = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|+\rangle |-\rangle + |-\rangle |+\rangle \right]. \end{aligned} \quad (219)$$

Напомним также обозначение для координатной части, которое мы ввели еще в прошлом семестре:

$$\Phi^\pm(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1) \right], \quad (220)$$

где $\psi_{1,2}(\vec{r}) \equiv \psi_{n_1, n_2}(\vec{r})$ — это координатные волновые функции отдельных электронов, то есть просто вектора состояний водородоподобного атома.

Подчеркнем, что полная волновая функция, $\psi_{s=0,1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, для любого значения суммарного спина должна быть антисимметричной при перестановке частиц, в силу принципа Паули. Действительно, ведь мы имеем дело с фермионами — частицами со спином $1/2$.

Для состояния (216) поправка к основному уровню энергии атома гелия, $E_{1,1}$ из (215), считается особенно легко. Действительно, так как координатная часть этого состояния симметрична, то используя волновые функции основного состояния атома водорода, получаем, что

$$\Phi^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi} e^{-Z(r_1+r_2)},$$

в атомных единицах. Спиновую часть волновой функции пока можно игнорировать.

В таком случае, как мы теперь знаем, для поиска первой поправки по теории возмущений надо вычислить интеграл:

$$\begin{aligned} E_{1,1}^{(1)} &= \langle \Phi^+ | \hat{V} | \Phi^+ \rangle = \frac{Z^6}{\pi^2} \int \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{e^{-2Z(r_1+r_2)}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \\ &= \frac{Z}{2^5 \pi^2} \int \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{e^{-r_1-r_2}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \end{aligned} \quad (221)$$

Для вычисления такого интеграла воспользуемся следующим трюком. Из определения:

$$\phi(\vec{r}_1) \equiv \int d^3\vec{r}_2 \frac{e^{-r_2}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (222)$$

следует, что $\phi(\vec{r}_1)$ решает уравнение Пуассона вида:

$$\Delta\phi(\vec{r}) = -4\pi e^{-r}. \quad (223)$$

Чтобы убедиться в том, что (222) решает (223), надо использовать метод функции Грина для поиска решения уравнения (223).

Поскольку рассматриваемое уравнение инвариантно относительно вращений, должно быть верно, что $\phi(\vec{r}) = \phi(r)$. В таком случае (223) упрощается до:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \phi(r) = -4\pi e^{-r}, \quad (224)$$

где мы использовали представление оператора Лапласа в сферических координатах. Последнее уравнение, в свою очередь, можно переписать как:

$$\frac{d^2}{dr^2} [r\phi(r)] = -4\pi e^{-r}.$$

Его решение будем искать в виде:

$$r \phi(r) = A r e^{-r} + \frac{B}{r} e^{-r} + C.$$

После подстановки этого выражения в (224), получаем, что:

$$A = -4\pi, \quad B = 2A = -8\pi$$

и, соответственно,

$$\phi(r) = -4\pi \left(1 + \frac{2}{r} \right) e^{-r} + \frac{C}{r}. \quad (225)$$

Константу C можно найти, взяв от обеих сторон уравнения (223) интеграл по большому объему и используя теорему Стокса:

$$\int \int \int d^3\vec{r} \Delta\phi(r) = \oint \left(d\vec{S}, \vec{\partial}\phi \right). \quad (226)$$

Если взять границу того объема, по которому ведется интегрирование, бесконечно большой, то из выражения (225) вклад в этот интеграл даст только последний член с C . Тогда, так как

$$\vec{\partial}\phi \approx -C \frac{\vec{r}}{r^3},$$

то интеграл от левой стороны уравнения (223) равен:

$$-C \oint \frac{\left(d\vec{S}, \vec{r} \right)}{r^3} = -C \oint d\Omega = -4\pi C.$$

В результате из интегрирования обеих сторон (223) мы получаем, что

$$C = \int \int \int d^3\vec{r} e^{-r} = \int \int \int d\Omega dr r^2 e^{-r} = 8\pi.$$

Таким образом, собирая все полученные соотношения вместе, для поправки (221) получаем:

$$\begin{aligned} E_{1,1}^{(1)} &= \frac{Z}{2^3 \pi} \int d^3\vec{r}_1 e^{-r_1} \phi(r_1) = \\ &= \frac{Z}{2^5 \pi^2} \int dr r^2 e^{-r} \left[-4\pi \left(1 + \frac{2}{r} \right) e^{-r} + \frac{8\pi}{r} \right] = \frac{5Z}{8}. \end{aligned}$$

Итак, поправленная энергия основного состояния равна:

$$E = -Z^2 + \frac{5Z}{8}, \quad (227)$$

в атомных единицах, где в случае гелия $Z = 2$. Полученный результат можно улучшить, используя вариационные методы, но это уже задача из задания.

5. Посмотрим теперь как обстоят дела если учесть наличие состояний со спином единица (218), (219). В этом случае, так как пространственная часть волновой функции антисимметрична, мы не можем взять одну и ту же $\psi_n(\vec{r})$ (например, основного состояния) для обоих электронов $\psi_{1,2}(\vec{r})$. Поэтому в качестве невозмущенных состояний с наименьшей энергией необходимо использовать:

$$\psi_1(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} Z^{3/2} e^{-Zr}, \quad \psi_2(r) = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} Z^{3/2} (2 - Zr) e^{-Zr/2}$$

— это волновые функции основного и первого возбужденного ($2s$) состояния кванта в кулоновом поле. Из таких волновых функций можно посторить $\Phi^\pm(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, где “ $-$ ” отвечает так называемому парасостоянию и полному спину ноль, а “ $+$ ” — ортосостоянию с полным спином единица, как следует из (216) и (218).

Вычисление матричных элементов возмущения по этим состояниям дает, что

$$E_{2,1}^{(1)} = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \delta_{S S'} \delta_{M_s M'_s} \langle \Phi^S | \hat{V} | \Phi^S \rangle,$$

где $\Phi^{S=1} = \Phi^+$, а $\Phi^{S=0} = \Phi^-$. Простые выкладки приводят к следующему ответу:

$$\langle \Phi^S | \hat{V} | \Phi^S \rangle = I + (-1)^S J, \quad (228)$$

где

$$I = \int \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{|\psi_1(r_1)|^2 |\psi_2(r_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (229)$$

а

$$J = \int \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{\psi_1^*(r_1) \psi_2(r_1) \psi_2^*(r_2) \psi_1(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (230)$$

Обратим внимание на то, что, несмотря на независимость потенциала возмущения от спина, поправки к энергии все же зависят от величины полного спина. Такое явление возникает из-за принципа Паули.

Физический смысл обоих вкладов, I и J , в первую поправку к энергии (228) достаточно прозрачен. Слагаемое I просто описывает взаимодействие двух плотностей зарядов, $\rho_{1,2}(r) = e |\psi_{1,2}(r)|^2$ друг с другом по закону Кулона.

Второе же слагаемое J классического аналога не имеет, поскольку содержит “перестановочные” члены, возникающие из-за симметрии полной координатной волновой функции относительно перестановки квантов. Поэтому J называется обменным интегралом, так как связан с обменным взаимодействием, упомянутым еще в прошлом семестре при обсуждении тождественных частиц.

Итак, видно, что расщепление уровней энергии между различными значениями полного спина равно:

$$\Delta E = E_{S=0} - E_{S=1} = 2J.$$

Иногда, чтобы подчеркнуть зависимость спектра от обменного взаимодействия, вводят так называемый эффективный спин-обменный потенциал в виде формального оператора, описывающего взаимодействие спинов:

$$\hat{V}_{ex} = -2J \left(\hat{s}_1, \hat{s}_2 \right). \quad (231)$$

В таком случае невозмущенный уровень энергии равен

$$E_0 = E_{n_1} + E_{n_2} + I - J,$$

а поправки к нему находятся вычислением среднего значения оператора (231) по состояниям с разными значениями полного спина.

Покажем теперь, что $J > 0$. Представим соответствующий интеграл (230) как:

$$J = \int d^3\vec{r}_1 \rho_{ex}^*(r_1) \phi_{ex}(r_1), \quad (232)$$

где

$$\rho_{ex}(r) = \psi_1(r)\psi_2^*(r), \quad \phi_{ex}(r_1) = \int d^3r_2 \frac{\rho_{ex}(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Тогда очевидно, что

$$\Delta\phi_{ex}(r) = -4\pi\rho_{ex}(r).$$

Соответственно $\phi_{ex}^*(r)$ удовлетворяет комплексно сопряженному уравнению. Используя эти наблюдения, выражение (232) можно переписать как

$$\begin{aligned} J &= -\frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r} \phi_{ex}(r) [\Delta\phi_{ex}^*(r)] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \oint \phi_{ex}(r) (\vec{\partial}\phi_{ex}^*, d\vec{S}) + \frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r} \vec{\partial}\phi_{ex} \vec{\partial}\phi_{ex}^* = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r} |\vec{\partial}\phi_{ex}|^2 > 0, \end{aligned}$$

где мы проинтегрировали по частям и учли, что интеграл по границе равен нулю, так как $\phi_{ex}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$.

Итак, поскольку обменный интеграл J положителен, из (228) следует, что ортосостояние, $S = 1$, имеет меньшую энергию, чем парасостояние, $S = 0$. Этому факту имеется простое физическое объяснение: в случае с $S = 1$ электроны находятся в одинаковых спиновых состояниях. В такой ситуации принцип Паули запрещает им находиться в одной точке. Поэтому возмущение, которое отвечает за отталкивание электронов $1/r_{12}$, дает меньший вклад, чем в случае с $S = 0$.

6. Как мы заметили в самом начале этой лекции, приближение, в котором в невозмущенной задаче электроны рассматриваются невзаимодействующими друг с другом, является не достаточно хорошим. Для улучшения ситуации, к невозмущенному гамильтониану каждого кванта,

$$\hat{H}_0^{(1,2)} = -\frac{1}{2} \Delta_{1,2} - \frac{Z}{r_{1,2}},$$

добавляют потенциальную энергию его взаимодействия с полем, создаваемым вторым электроном. Такое поле зависит от состояний электронов и называется самосогласованным.

Самосогласованное поле, как можно теперь догадаться, состоит из двух вкладов. Первый — это собственно классический кулоновский потенциал:

$$\phi_{1,2}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \frac{|\psi_{2,1}(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Второй вклад — обменный:

$$\phi_{ex}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \frac{\psi_1(\vec{r}') \psi_2^*(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}.$$

Получается, что в определении самосогласованного поля участвуют обе волновые функции. Поэтому вместо двух независимых одночастичных задач, мы получаем систему двух связанных уравнений:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{1}{2} \Delta - \frac{2}{r} + \phi_1(\vec{r}) \right] \psi_1(\vec{r}) + \phi_{ex}(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) &= E_1 \psi_1(\vec{r}), \\ \left[-\frac{1}{2} \Delta - \frac{2}{r} + \phi_2(\vec{r}) \right] \psi_2(\vec{r}) + \phi_{ex}^*(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) &= E_1 \psi_2(\vec{r}). \end{aligned} \quad (233)$$

Рассматриваемая аппроксимация обсуждаемой задачи называется приближением Хартри–Фока. Иногда, для упрощения задачи, в нулевом приближении из уравнения исключают обменный потенциал ϕ_{ex} . Тогда два уравнения в системе почти расщепляются. Мы говорим “почти”, потому что $\psi_{1,2}$ присутствуют в $\phi_{2,1}$. Такая аппроксимация называется приближением Хартри.

VIII. Лекция. *Нерелятивистский предел уравнения Дирака, уравнение Паули, релятивистские поправки к уровням энергии водородоподобного атома, локальное и спин-орбитальное взаимодействие, атом в магнитном поле, нормальный и аномальный эффекты Зеемана, эффект Папена-Бака.*

1. Чтобы изучить другие важные на практике примеры использования стационарной теории возмущений, рассмотрим нерелятивистский предел уравнения Дирака во внешнем поле:

$$\left[i \hbar \gamma^\mu \left(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu \right) - m c \right] \hat{\Psi}(\underline{x}) = 0.$$

В стандартном представлении γ -матриц это уравнение можно переписать в следующем виде:

$$(i \hbar \partial_t - e \phi) \hat{\Psi} = c \hat{\alpha} \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \hat{\Psi} + \hat{\beta} m c^2 \hat{\Psi}, \quad (234)$$

где мы ввели обозначение $A_0 = \phi$. Пусть ϕ и \vec{A} медленно зависят от времени. Если теперь выразить четырехкомпонентный спинор через двухкомпонентные спиноры $\hat{\psi}(\vec{x})$ и $\hat{\chi}(\vec{x})$:

$$\hat{\Psi}(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \hat{\psi}(\vec{x}) \\ \hat{\chi}(\vec{x}) \end{pmatrix} e^{-\frac{iEt}{\hbar}},$$

то уравнение (234) можно переписать в виде системы следующего вида:

$$\begin{aligned} (E - e\phi - m c^2) \hat{\psi} &= c \hat{\sigma} \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \hat{\chi}, \\ (E - e\phi + m c^2) \hat{\chi} &= c \hat{\sigma} \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \hat{\psi}. \end{aligned} \quad (235)$$

В нерелятивистском пределе, когда

$$E \approx m c^2 \gg \frac{\vec{p}^2}{2m} - e\phi,$$

из второго уравнения в лидирующем порядке мы получаем, что:

$$\hat{\chi} \approx \frac{\hat{\sigma} \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)}{2 m c} \hat{\psi}. \quad (236)$$

То есть в таком случае $|\hat{\chi}| \ll |\hat{\psi}|$ и опять же в лидирующем порядке плотность заряда равна $\rho = \hat{\Psi}^+ \hat{\Psi} \approx \hat{\psi}^+ \hat{\psi}$, как и должно быть в нерелятивистском пределе.

Обозначим нерелятивистскую кинетическую энергию как $E - m c^2 \equiv \epsilon$. Тогда после подстановки выражения (236) для $\hat{\chi}$ в первое из уравнений (235), получаем:

$$\epsilon \hat{\psi} \approx \frac{\left[\hat{\sigma} \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right]^2}{2 m} \hat{\psi} + e \phi \hat{\psi}. \quad (237)$$

Теперь используя соотношение

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{jk} \hat{\mathbf{1}} + i \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l, \quad (238)$$

прделаем следующие преобразования:

$$\begin{aligned} & \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k \left(\hat{P}_j - \frac{e}{c} A_j \right) \left(\hat{P}_k - \frac{e}{c} A_k \right) = \\ & = \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + i \epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l \left(\hat{P}_j - \frac{e}{c} A_j \right) \left(\hat{P}_k - \frac{e}{c} A_k \right) = \\ & = \left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e \hbar}{c} \left(\hat{\sigma}, \text{rot} \vec{A} \right). \end{aligned}$$

Учитывая, что $\text{rot} \vec{A} = \vec{B}$, из (237) мы получаем так называемое уравнение Паули:

$$\epsilon \hat{\psi}(\vec{x}) \approx \left[\frac{\left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2}{2 m} - \frac{e \hbar}{2 m c} \left(\hat{\sigma}, \vec{B} \right) + e \phi \right] \hat{\psi}(\vec{x}), \quad (239)$$

которое описывает нерелятивистское стационарное движение кванта со спином 1/2 во внешнем электромагнитном поле. Именно вклад описывающий взаимодействие спина с внешним магнитным полем и отсутствовал в нерелятивистском пределе уравнения ШФКГ, который

мы обсуждали на одной из предыдущих лекций этого семестра. В прошлом семестре мы ввели это вклад в гамильтониан эмпирически, здесь же он получен из первых принципов.

Рассмотрим внимательнее гамильтониан Паули в случае однородного поля \vec{B} . Для практически точечного атома, находящегося во внешнем магнитном поле можно считать, что оно однородно на его размерах. В этом случае, как мы помним из курса теории поля,

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{B} \times \vec{x}],$$

поэтому $\text{div} \vec{A} = 0$. $[\hat{P}_j, A_j] \sim \text{div} \vec{A} = 0$ и гамильтониан Паули из (239) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{P}^2}{2m} - \frac{e}{mc} \vec{A} \hat{P} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + 2\mu_0 (\vec{B}, \hat{s}) + e\phi = \\ &= \frac{\hat{P}^2}{2m} + \mu_0 \left((\hat{L} + 2\hat{s}), \vec{B} \right) + \frac{e^2}{8mc^2} [\vec{B} \times \vec{x}]^2 + e\phi, \end{aligned} \quad (240)$$

где $\mu_0 = -\frac{e\hbar}{2mc} = -0,927 \cdot 10^{-20}$ эрг/Гс — магнетон Бора. Из полученного выражения сразу видно, что магнитный момент связанный со спином $\hat{s} = \hat{\sigma}/2$ в два раза больше, чем магнитный момент связанный орбитальным моментом $\hat{L} = -i [\vec{x} \times \hat{\partial}]$.

Наконец получим плотность тока в нерелятивистском пределе:

$$\hat{j} = e \hat{\Psi} \vec{\gamma} \hat{\Psi} = e \hat{\Psi}^+ \hat{\alpha} \hat{\Psi} = e (\hat{\psi}^+ \hat{\sigma} \hat{\chi} + \hat{\chi}^+ \hat{\sigma} \hat{\psi}).$$

Подставляя сюда соотношение (236) и сопряженное ему выражение и опять используя (238), получим:

$$\hat{j} \approx \frac{i\hbar e}{2m} (\hat{\psi}^+ \overleftarrow{\partial} \hat{\psi} - \hat{\psi}^+ \overrightarrow{\partial} \hat{\psi}) - \frac{e^2}{mc} \vec{A} \hat{\psi}^+ \hat{\psi} + \frac{\hbar e}{2m} \text{rot} (\hat{\psi}^+ \hat{\sigma} \hat{\psi}). \quad (241)$$

Таким образом, в плотности тока возникает дополнительный вклад связанный с магнитным моментом (спином) электрона.

2. Рассмотрим теперь следующий порядок в нерелятивистском разложении уравнения Дирака. Это нам необходимо для изучения релятивистских поправок к атомным уровням энергии. Для этого найдем вторую поправку ($\sim 1/c^2$) к уравнению Паули, предполагая наличие только электрического поля, то есть $\vec{A} = 0$. Во-первых, это упростит

выражения. А во-вторых, для уровней энергии в поле Кулона только такую ситуацию рассматривать и необходимо.

Прежде всего заметим, что с учетом поправки порядка $1/c^2$ плотность вероятности имеет вид:

$$\rho = |\hat{\psi}|^2 + |\hat{\chi}|^2 \approx |\hat{\psi}|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} |\hat{\sigma} \vec{\partial} \hat{\psi}|^2,$$

что отличается от шредингеровского выражения, которое мы получили выше в лидирующем порядке c^0 . Поэтому необходимо поправить вектор состояния $\hat{\psi}$, таким образом, что

$$\int |\hat{\psi}|^2 d^3 \vec{x} \approx \int d^3 \vec{x} \left[|\hat{\psi}|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\vec{\partial} \hat{\psi}^+ \hat{\sigma}) (\hat{\sigma} \vec{\partial} \hat{\psi}) \right]. \quad (242)$$

После интегрирования по частям второй вклад справа последнего соотношения принимает вид:

$$\int d^3 \vec{x} (\vec{\partial} \hat{\psi}^+ \hat{\sigma}) (\hat{\sigma} \vec{\partial} \hat{\psi}) = - \int d^3 \vec{x} \hat{\psi}^+ (\hat{\sigma} \vec{\partial} \hat{\sigma} \vec{\partial} \hat{\psi}) = - \int d^3 \vec{x} \hat{\psi}^+ \Delta \hat{\psi},$$

где на последнем шаге мы опять использовали (238). Или, аналогичным образом

$$\int d^3 \vec{x} (\vec{\partial} \hat{\psi}^+ \hat{\sigma}) (\hat{\sigma} \vec{\partial} \hat{\psi}) = - \int d^3 \vec{x} (\Delta \hat{\psi}^+) \hat{\psi}.$$

В результате из (242) следует, что:

$$\int \hat{\psi}^+ \hat{\psi} d^3 \vec{x} \approx \int d^3 \vec{x} \left\{ \hat{\psi}^+ \hat{\psi} - \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} [\hat{\psi}^+ \Delta \hat{\psi} + (\Delta \hat{\psi}^+) \hat{\psi}] \right\}.$$

Поэтому нужно сделать следующее переопределение двухкомпонентного спинорного вектора состояния:

$$\hat{\psi} \approx \left(1 + \frac{\hat{p}^2}{8m^2 c^2} \right) \hat{\psi}, \quad \hat{\psi} \approx \left(1 - \frac{\hat{p}^2}{8m^2 c^2} \right) \hat{\psi}. \quad (243)$$

Далее, в случае когда $\vec{A} = 0$, вместо (236) во втором порядке разложения по $1/c$ имеем:

$$\hat{\chi} \approx \frac{1}{2mc} \left(1 - \frac{\epsilon - e\phi}{2mc^2} \right) (\hat{\sigma}, \hat{p}) \hat{\psi}.$$

Подставим это выражение в первое уравнение из (235) с $\vec{A} = 0$ и сделаем замену (243). Тогда мы получим стационарное уравнение Шредингера (на $\hat{\psi}$, в не $\hat{\psi}$) с энергией ϵ и гамильтонианом вида:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{e}{4m^2c^2} \left[(\hat{\sigma}, \hat{p}) \phi (\hat{\sigma}, \hat{p}) - \frac{1}{2} (\hat{p}^2 \phi + \phi \hat{p}^2) \right]. \quad (244)$$

Присутствующее здесь выражение в скобках можно преобразовать используя несколько раз соотношение (238):

$$\begin{aligned} & (\hat{\sigma}, \hat{p}) \phi (\hat{\sigma}, \hat{p}) - \frac{1}{2} (\hat{p}^2 \phi + \phi \hat{p}^2) = \\ & = \phi \hat{p}^2 + (\hat{\sigma}, \hat{p} \phi) (\hat{\sigma}, \hat{p}) - \frac{1}{2} (\hat{p}^2 \phi + \phi \hat{p}^2) = \\ & = i\hbar (\hat{\sigma}, \vec{E}) (\hat{\sigma}, \hat{p}) - \frac{1}{2} (\hat{p}^2 \phi - \phi \hat{p}^2) = \\ & = i\hbar (\hat{\sigma}, \vec{E}) (\hat{\sigma}, \hat{p}) + \frac{\hbar^2}{2} \Delta \phi - i\hbar (\vec{E}, \hat{p}) = \\ & = -\hbar (\hat{\sigma}, [\vec{E} \times \hat{p}]) - \frac{\hbar^2}{2} \operatorname{div} \vec{E}, \end{aligned}$$

где мы использовали, что $\vec{E} = -\vec{\partial}\phi$ — электрическое поле для потенциала ϕ .

Таким образом, (244) преобразуется в:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} (\hat{\sigma}, [\vec{E} \times \hat{p}]) - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \operatorname{div} \vec{E}. \quad (245)$$

Подчеркнем, что полученное выражение для гамильтониана с релятивистскими поправками применимы и для сложных атомов. В этом случае необходимо просуммировать все вклады в \hat{H} по всем электронам в атоме.

В случае поля Кулона созданного ядром,

$$-\Delta \phi = \operatorname{div} \vec{E} = 4\pi Z e \delta(\vec{x}),$$

и последний вклад в (245) можно упростить. Происхождение этого вклада в \hat{H} можно объяснить из общих физических соображений. Неопределенность в положении электрона в атоме можно грубо оценить как $|\delta\vec{x}| \sim \hbar/mc$. Поэтому в некотором смысле взаимодействие электрона с полем ядра оказывается нелокальным:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{loc} &\sim \langle \delta V \rangle = \langle V(\vec{x} + \delta\vec{x}) - V(\vec{x}) \rangle \approx \\ &\approx \left\langle \left(\delta\vec{x}, \vec{\nabla} V \right) + \frac{1}{2} \sum_{j,k} \delta x_j \delta x_k \partial_j \partial_k V \right\rangle = \frac{1}{6} \langle \delta\vec{x}^2 \rangle \partial^2 V \approx \frac{1}{6} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \Delta V, \end{aligned}$$

что совпадает с последним вкладом в (245) с точностью до числового коэффициента.

В предпоследнем же вкладе в (245) в случае центрального поля, когда

$$\vec{E} = -\frac{\vec{x}}{r} \frac{d\phi}{dr}, \quad \vec{x} \equiv \vec{r},$$

можно проделать следующие преобразования:

$$\frac{e\hbar}{4m^2 c^2 r} \left(\hat{\sigma}, [\vec{x} \times \hat{p}] \right) \frac{d\phi}{dr} = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2 r} V'(r) \left(\hat{L}, \hat{s} \right), \quad (246)$$

где использовано обозначение $V = e\phi$, а \hat{L} — это оператор орбитального момента. В результате мы получили потенциальную энергию, которая описывает взаимодействие орбитального момента со спином.

Происхождение такого вклада в гамильтониане можно объяснить следующим образом. Электрон имеет собственный магнитный момент, связанный с наличием спина $\hat{\mu} = -\frac{e\hbar}{mc} \hat{s}$. В атоме он движется со скоростью \vec{v} и следовательно в лабораторной системе отсчета он создает электрический дипольный момент вида:

$$\hat{d} = \frac{1}{c} [\vec{v} \times \hat{\mu}] = \frac{[\hat{p} \times \hat{\mu}]}{mc}.$$

А этот дипольный момент, в свою очередь, взаимодействует с электрически полем ядра как:

$$\hat{V}_{sl} \sim - \left(\hat{d}, \vec{E} \right) = -\frac{Ze}{mc r^3} \left(\hat{\mu}, [\vec{x} \times \hat{p}] \right) = \frac{Ze^2 \hbar^2}{m^2 c^2} \frac{(\hat{s}, \hat{L})}{r^3},$$

что совпадает с (246) с точностью до числового фактора $1/2$, если $V(r)$ имеет кулоновский вид. Этот фактор объясняется присутствием томасовской прецессии, которая известна нам с курса теории поля.

3. Применим теперь теорию возмущений для вычисления релятивистских поправок к уровням энергии водородоподобного атома. В прошлом семестре в нерелятивистском приближении мы получили следующий спектр энергий:

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}, \quad (247)$$

где a_0 — это радиус боровской орбиты. С учетом релятивистских поправок это выражение можно принять теперь только лишь в качестве нулевого приближения для энергетических уровней атома. То есть мы имеем как раз ситуацию $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Z e^2}{r},$$

$$\hat{V} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2} + \frac{Z e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{(\hat{s}, \hat{L})}{r^3} + \frac{\pi}{2} Z e^2 \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \delta(\vec{x}). \quad (248)$$

Как мы знаем с прошлого семестра, в нулевом приближении состояния электрона в атоме характеризуются следующими квантовыми числами:

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad 0 \leq l \leq n - 1, \quad |m| \leq l,$$

и уровни (247) вырождены по l и m .

Однако детальное наблюдение спектров атомов показывает, что спектральные линии обладают тонкой структурой, которую нельзя объяснить в рамках нерелятивистской квантовой механики. Как мы сейчас увидим эта структура может быть вполне объяснена с учетом релятивистских поправок в рамках теории возмущений. А именно, тонкое расщепление спектра можно объяснить снятием вырождения при учете релятивистских и спиновых эффектов.

Итак, найдем поправки к (247), используя (248) по теории возмущений. Выбор стандартных векторов состояний

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

в качестве правильных волновых функций нулевого приближения не подходит, ибо они являются собственными векторами оператора \hat{L}_z , а он не коммутирует с \hat{V} . Действительно,

$$\left[\left(\hat{\vec{s}}, \hat{\vec{L}} \right), \hat{L}_z \right] \neq 0,$$

и поэтому матрица $\langle nlm | \hat{V} | n'l'm' \rangle$ не является диагональной, а поиск ее собственных чисел сильно усложнил бы задачу.

Однако, мы выяснили на предыдущих лекциях, что

$$\left[\left(\hat{\vec{s}}, \hat{\vec{L}} \right), \hat{J}_z \right] = 0, \quad \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{s}}.$$

То есть точным интегралом движения является z -проекция полного углового момента. Это значит, что для решения нашей задачи необходимо перейти от собственных состояний операторов \hat{H}_0 , $\hat{\vec{L}}^2$, \hat{s}_z^2 , \hat{s}_z и \hat{L}_z к собственным операторов \hat{H}_0 , $\hat{\vec{L}}^2$, \hat{s}_z^2 , $\hat{\vec{J}}^2$ и \hat{J}_z . Этот переход мы проделали при обсуждении сложения моментов $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{s}}$.

Соответственно вместо факторизованного набора χY_{lm} со спиновой χ и сферической Y_{lm} волновыми функциями мы будем использовать найденные ранее шаровые спиноры. То есть правильные векторы состояний нулевого приближения имеют вид:

$$\hat{\psi}_{nlM}^J(r, \theta, \varphi) \equiv \langle r\theta\varphi | nJlM \rangle = R_{nl}(r) \hat{Y}_{JlM}(\theta, \varphi), \quad (249)$$

где $J = l \pm \frac{1}{2}$, если $l \neq 0$ и $J = \frac{1}{2}$, если $l = 0$, а M — проекция полного момента J на ось z .

Напомним, что шаровые спиноры задают ортонормированный базис. Подчеркнем также, что такой двухкомпонентный спинор решает уравнение Шредингера для водородоподобного атома, так как каждая его компонента пропорциональна сферической гармонике с данным l .

4. Итак, первый вклад в (248) дает так называемую релятивистскую поправку вида:

$$\begin{aligned} E_{rel}^{(1)} &= - \left\langle nJlM \left| \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} \right| nJlM \right\rangle = \\ &= - \frac{1}{2mc^2} \left\langle nJlM \left| \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^2 \right| nJlM \right\rangle. \end{aligned} \quad (250)$$

С учетом того, что

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \right] |nJM\rangle = E_n^{(0)} |nJM\rangle,$$

как мы объяснили чуть выше, выражение в (250) можно переписать как:

$$\begin{aligned} E_{rel}^{(1)} &= -\frac{1}{2m c^2} \left\langle nJM \left| \left(E_n^{(0)} + \frac{Ze^2}{r} \right)^2 \right| nJM \right\rangle = \\ &= -\frac{1}{2m c^2} \left[\left(E_n^{(0)} \right)^2 + 2 E_n^{(0)} Z e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + (Z e^2)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right], \end{aligned} \quad (251)$$

Здесь для вычисления средних $\langle 1/r \rangle$ и $\langle 1/r^2 \rangle$ мы воспользуемся следующими трюками. (Вообще говоря, эти средние известны нам с прошлого семестра.) Во-первых, в силу теоремы вириала, среднее значение потенциальной энергии кванта, $-e^2/r$, равно его удвоенной полной энергии. Из этого получаем, что

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z m e^2}{\hbar^2 n^2} = \frac{Z}{a_0 n^2}. \quad (252)$$

Для вычисления же $\langle 1/r^2 \rangle$ удобно воспользоваться следующей теоремой:

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle n \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle,$$

которая нам известна еще с прошлого семестра. Для произвольного центрального поля, в котором радиальное движение описывается гамильтонианом

$$\hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + V(r),$$

в качестве параметра удобно выбрать $\lambda = l$. Тогда из рассматриваемой теоремы находим, что:

$$\frac{\partial E_{n_r, l}}{\partial l} = \left\langle n_r, l \left| \frac{\partial \hat{H}_r}{\partial \lambda} \right| n_r, l \right\rangle = \left\langle n_r, l \left| \frac{\hbar^2 (2l+1)}{2m r^2} \right| n_r, l \right\rangle.$$

В частности, для водородоподобного атома, в котором

$$E_{n_r, l} = -\frac{Z^2 m e^4}{2 \hbar^2 (n_r + l + 1)^2},$$

получается, что

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2 m^2 e^4}{\hbar^4 n^3 (l + \frac{1}{2})} = \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (l + \frac{1}{2})}. \quad (253)$$

С использованием (252) и (253) из (251) мы получаем окончательное выражение:

$$E_{rel}^{(1)} = E_n^{(0)} \frac{Z \alpha_0^2}{n^2} \left[\frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right], \quad (254)$$

где $\alpha_0 = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры. Такую поправку можно найти из нерелятивистского приближения к уравнению ШФКГ. В теории Дирака, однако, из-за наличия спина, мы имеем и другие поправки в обсуждаемом порядке теории возмущений.

5. А именно, поправка за счет спин-орбитального вклада в (248) имеет вид:

$$E_{sl}^{(1)} = \frac{Z e^2 \hbar^2}{2 m^2 c^2} \left\langle nJM \left| \frac{(\hat{\vec{s}}, \hat{\vec{L}})}{r^3} \right| nJM \right\rangle. \quad (255)$$

Для вычисления этого матричного элемента заметим, что

$$\begin{aligned} \left\langle JM \left| (\hat{\vec{s}}, \hat{\vec{L}}) \right| JM \right\rangle &= \frac{1}{2} \left\langle JM \left| \left(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{s}}^2 \right) \right| JM \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \begin{cases} J(J+1) - l(l+1) - s(s+1), & l \neq 0 \\ 0, & l = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (256)$$

Чтобы найти это среднее нам нужна только угловая и спинорная часть волновой функции, а радиальная не нужна.

Чтобы найти $\langle 1/r^3 \rangle$ воспользуемся следующим тождеством:

$$\left\langle nl \left| \left[\frac{d}{dr}, \hat{H}_r \right] \right| nl \right\rangle = 0, \quad (257)$$

которое следует из того, что $|nl\rangle$ является собственным вектором оператора \hat{H}_r . Для вычисления рассматриваемого среднего нужна только радиальная часть полной волновой функции, а угловая и спинорная не нужна. При этом:

$$\left[\frac{d}{dr}, \hat{H}_r \right] = \frac{1}{m r^2} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{m r^3} + \frac{Z e^2}{r^2}. \quad (258)$$

Среднее $\langle 1/r^2 \rangle$ мы уже нашли выше. Первое же слагаемое на правой стороне последнего соотношения можно преобразовать к:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \right\rangle &= \int d^2\Omega \int_0^\infty dr r^2 \psi_{nl}^* \frac{1}{r^2} \frac{d\psi_{nl}}{dr} = \\ &= \frac{1}{2} \int d^2\Omega \int_0^\infty dr \frac{d|\psi_{nl}|^2}{dr} = -2\pi |\psi_{nl}(0)|^2. \end{aligned}$$

При этом, как мы знаем еще с прошлого семестра $|\psi_{nl}(0)|^2$ отлична от нуля только в случае $l = 0$. Таким образом, учитывая, что

$$|\psi_{nl}(0)|^2 = \frac{Z^3 m^3 e^6}{\pi \hbar^6 n^3} \delta_{l0} = \frac{Z^3}{\pi a^3 n^3} \delta_{l0}, \quad (259)$$

получаем из (257) и (258), что

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3 m^3 e^6}{\hbar^6 n^3 l(l+1) \left(l + \frac{1}{2}\right)} (1 - \delta_{l0}) = \frac{Z^3 (1 - \delta_{l0})}{a_0^3 n^3 l(l+1) \left(l + \frac{1}{2}\right)}. \quad (260)$$

Теперь, собирая последнее выражение вместе с (256), из (255) получаем поправку следующего вида:

$$E_{sl}^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{Z^2 \alpha_0^2}{n} \frac{J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2l(l+1) \left(l + \frac{1}{2}\right)} (1 - \delta_{l0}). \quad (261)$$

Осталось учесть последний вклад из (248). Этот член в гамильтониане дает так называемую контактную поправку:

$$E_{con}^{(1)} = \frac{\pi}{2} Z e^2 \left(\frac{\hbar}{m c} \right)^2 |\psi_{nl}(0)|^2 = -E_n^{(0)} \frac{Z^2 \alpha_0^2}{n} \delta_{l0}, \quad (262)$$

где мы использовали (259).

Наконец, собирая вместе (254), (261) и (262), мы находим полный вклад первой поправки теории возмущений в спектр:

$$\begin{aligned} E_{nJ} &\approx E_n^{(0)} + E_{rel}^{(1)} + E_{sl}^{(0)} + E_{con}^{(1)} = \\ &= -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{e^2}{a_0} \left[1 + \frac{Z^2 \alpha_0^2}{n^2} \left[\frac{n}{J + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \right]. \end{aligned} \quad (263)$$

Это выражение совпадает с тем, что мы нашли на одной из прошлых лекций из нерелятивистского разложения точного спектра уравнения Дирака в поле Кулона.

6. В заключении этой лекции, рассмотрим атом в постоянном магнитном поле. В самом начале этой лекции мы нашли, что гамильтониан для такого случая имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_Z + \hat{V}_D + \dots,$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{a=1}^N \left[\frac{\hat{p}_a^2}{2m} - \frac{Z e^2}{r_a} \right], \\ \hat{V}_Z &= \mu_0 \left(\vec{B}, \vec{L} + 2 \vec{s} \right), \\ \hat{V}_D &= \frac{e^2}{8m} \sum_{a=1}^N \left[\vec{B} \times \vec{r}_a \right]^2 = \frac{e^2 B^2}{8m c^2} \sum_{a=1}^N r_a^2 \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (264)$$

Здесь мы рассматриваем атом с N электронами и не учитываем в \hat{H} их взаимодействие по закону Кулона между собой (обратите внимание на многоточие в выражении для \hat{H}), так как нас сейчас интересует только их взаимодействие с внешним магнитным полем. Очевидно, что для сложного атома во всех выражениях выше стоят суммы по всем электронам в нем.

Оценим по порядку величины средние от зеемановского взаимодействия $\langle \hat{V}_Z \rangle$ и от диамагнитного $\langle \hat{V}_D \rangle$:

$$\langle \hat{V}_Z \rangle \sim \frac{e \hbar B L_0}{m c} \sim \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\hbar^2}{m c^2} e B = \alpha_0 \frac{e}{a_0^3} a_0^3 B \sim \alpha_0 E_0 B a_0^3, \quad (265)$$

где L_0 и E_0 — это характерные атомные величины углового момента и электрического поля. Далее,

$$\langle \hat{V}_D \rangle \sim \frac{e^2}{m c^2} B^2 a_0^2 = \frac{e^4}{\hbar^2 c^2} \frac{\hbar^2}{m c^2} B^2 a_0^2 = \alpha_0^2 B^2 a_0^3. \quad (266)$$

Таким образом, отношение этих величин по порядку величины очень мало:

$$\frac{\langle \hat{V}_D \rangle}{\langle \hat{V}_Z \rangle} \sim \alpha_0 \frac{B}{E_0} \ll 1,$$

для характерных магнитных полей достижимых при нынешнем уровне технологий: $B \ll E_0/\alpha_0$. Следовательно, величиной $\langle \hat{V}_D \rangle$ всегда можно пренебречь, если $\langle \hat{V}_Z \rangle \neq 0$.

При этом, если сравнить $\langle \hat{V}_Z \rangle$ со спин–орбитальным взаимодействием $\langle \hat{V}_{sl} \rangle$, то они тоже оказываются одного порядка в достаточно сильных магнитных полях: $B \sim \alpha_0 E_0 \sim 10^4 - 10^5$ Гаусс. Таким образом, выделение невозмущенного гамильтониана в обсуждаемой задаче зависит от соотношения зеемановской энергии взаимодействия $\langle \hat{V}_Z \rangle$ и спин–орбитальной. Поэтому решение задачи по теории возмущений в общем случае возможно только в двух приближениях:

- Слабое внешнее магнитное поле, $\langle \hat{V}_Z \rangle \ll \langle \hat{V}_{sl} \rangle$ (аномальный эффект Зеемана).
- Сильное внешнее магнитное поле, $\langle \hat{V}_Z \rangle \gg \langle \hat{V}_{sl} \rangle$ (так называемый нормальный эффектом Зеемана или эффект Пашена–Бака).

В слабом магнитном поле невозмущенный гамильтониан совпадает с гамильтонианом невозмущенного атома, но с учетом релятивистских поправок, включая спин–орбитальное взаимодействие. Поэтому в качестве правильных векторов состояний нулевого приближения следует выбрать те, что были рассмотрены выше:

$$|\psi^{(0)}\rangle = |nJM\rangle,$$

Легко видеть, что \hat{V}_Z не коммутирует с \hat{J}^2 , но коммутирует с \hat{J}_z , если поле B направлено вдоль оси z . Поэтому вырождение по M (проекции

полного момента) должно сняться в первом порядке теории возмущений, так как к каждому уровню будет своя поправка $\langle \hat{V}_Z \rangle$. Действительно, запишем оператор возмущения в виде:

$$\hat{V}_Z = \mu_0 B \left(\hat{J}_z + \hat{s}_z \right) \equiv \hbar \Omega \left(\hat{J}_z + \hat{s}_z \right).$$

Первое слагаемое в этом операторе коммутирует с невозмущенным гамильтонианом, поэтому матрица возмущения имеет вид:

$$\langle lJM' | \hat{V}_Z | lJM \rangle = \hbar \Omega \left(M \delta_{M'M} + \langle lJM' | \hat{s}_z | lJM \rangle \right). \quad (267)$$

Далее, поскольку $[\hat{J}_z, \hat{s}_z] = 0$, то мы имеем, что:

$$0 = \langle lJM' | \hat{J}_z \hat{s}_z - \hat{s}_z \hat{J}_z | lJM \rangle = (M - M') \langle lJM' | \hat{s}_z | lJM \rangle.$$

Откуда сразу следует, что

$$\langle lJM' | \hat{s}_z | lJM \rangle = \text{const} \cdot \delta_{M'M}.$$

С другой стороны имеем также, что

$$\langle lJM' | \hat{J}_z | lJM \rangle = M \delta_{M'M}.$$

Иными словами, можно записать, что

$$\langle lJM' | \hat{s}_z | lJM \rangle = \lambda \langle lJM' | \hat{J}_z | lJM \rangle = \langle lJM' | \lambda \hat{J}_z | lJM \rangle,$$

для некоторой константы λ .

Заметим теперь, что операторы \hat{s}_z и $\lambda \hat{J}_z$ удовлетворяют одинаковым коммутационным соотношениям с операторами, задающими полный набор физических величин, которые определяют состояние невозмущенного атома. А именно:

$$[\hat{J}_j, \hat{s}_k] = i \epsilon_{jkl} \hat{s}_l, \quad [\hat{J}_j, \lambda \hat{J}_k] = i \epsilon_{jkl} \lambda \hat{J}_l.$$

Поэтому для состояний, относящихся к одному и тому же терму, можно считать, что

$$\hat{\vec{s}} | lJM \rangle = \lambda \hat{\vec{J}} | lJM \rangle,$$

а коэффициент пропорциональности λ можно определить из вычисления любого матричного элемента. Рассмотрим, например, скалярное произведение $(\hat{J}, \hat{s}) \sim \lambda \hat{J}^2$ (что означает, что эти операторы эквивалентны под знаком среднего по рассматриваемым состояниям) и вычислим его среднее по состоянию $|lJM\rangle$:

$$\begin{aligned} \lambda \langle lJM | \hat{J}^2 | lJM \rangle &\equiv \lambda \langle \hat{J}^2 \rangle = \lambda J(J+1) = \\ &= \langle (\hat{J}, \hat{s}) \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \left[\hat{J}^2 - \hat{L}^2 + \hat{s}^2 \right] \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} [J(J+1) - l(l+1) + s(s+1)]. \end{aligned}$$

Откуда сразу следует, что

$$\lambda = \frac{J(J+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2J(J+1)}. \quad (268)$$

Таким образом, матрица возмущения (267) диагональна и ее ненулевые элементы определяют поправки первого порядка к уровням энергии:

$$E^{(1)} = \hbar \Omega g_{lsJ} M,$$

где

$$g_{lsJ} = 1 + \frac{J(J+1) - l(l+1) + s(s+1)}{2J(J+1)}$$

— это фактор Ланде. Окуда видно, что в слабом магнитном поле исходное вырождение полностью снимается.

Обсудим теперь случай эффекта Пашена–Бака, который отвечает ситуации, когда $\langle \hat{V}_Z \rangle \gg \langle \hat{V}_{sl} \rangle$, как мы подчеркнули выше. Такая ситуация встречается только для атомов с аномально малой величиной спин–орбитального взаимодействия, потому что поле в 10^5 Гаусс очень велико даже для современных сверхпроводящих соленоидов.

Мы будем решать задачу в приближении, в котором спин–орбитальным взаимодействием вообще можно пренебречь. В этом случае ситуация сильно упрощается и в качестве правильных состояний нулевого приближения можно взять:

$$|\psi^{(0)}\rangle = |lm\rangle |s, m_s\rangle,$$

то есть факторизованные, как для обычного уравнения Шредингера для водородоподобного атома. Тогда эти уровни вырождены $(2l+1) \times (2s+1)$ -кратно.

В рассматриваемой ситуации поправки первого порядка имеют вид:

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle lm' | \langle s, m'_s | \hbar\Omega (\hat{L}_z + 2\hat{s}_z) | lm \rangle | s, m_s \rangle = \\ &= \delta_{m'l} \delta_{m'_s m_s} \hbar\Omega (m + 2m_s). \end{aligned}$$

Как и в случае аномального эффекта Зеемана расщепление тоже эквидистантно, но теперь вырождение снимается не полностью. Невырожденными оказываются только “крайние” уровни с поправками $\pm \hbar\Omega (l + 2s)$.

7. Рассмотрим теперь ситуацию, когда атом находится в состоянии $l = s = 0$ — атом инертного газа, например. Тогда \hat{V}_Z не дает вклада в поправки к невозмущенному уровню энергии ни в каком порядке теории возмущений. Действительно, все матричные элементы вида

$$\langle lJM | \hat{L}_z + 2\hat{s}_z | 0000 \rangle = 0$$

— равны нулю. В таком случае возникает необходимость учитывать возмущение \hat{V}_D из (264) и мы получаем, что:

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{8m c^2} B^2 \left\langle \sum_{a=1}^N r_a^2 \sin^2 \theta \right\rangle.$$

Поскольку s-состояние атома $|0000\rangle$ сферически симметрично, то $\langle \sin^2 \theta \rangle = \frac{2}{3}$. Поэтому

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{12m c^2} B^2 \sum_{a=1}^N \langle r_a^2 \rangle > 0.$$

Этот факт имеет одно важное физическое следствие. А именно, магнитная восприимчивость ансамбля таких атомов оказывается меньше нуля:

$$\chi = -\frac{\partial E^{(1)}}{\partial B^2} = -\frac{e^2}{6m c^2} \sum_{a=1}^N \langle r_a^2 \rangle < 0,$$

то есть газ из таких атомов обладает диамагнитными свойствами.

IX. Лекция. *Представление взаимодействия, формула Кембелла–Бейкера–Хаусдорфа, общие положения нестационарной теории возмущений для дискретного спектра, соотношение неопределенностей Гейзенберга для энергии и времени, возмущение действующее долго, быстро и медленно меняющиеся возмущения для дискретного спектра, общие положения нестационарной теории возмущений для непрерывного спектра, золотое правило Ферми.*

1. С этой лекции мы переходим к обсуждению нестационарной теории возмущений, когда хотя бы какая-то часть полного гамильтониана зависит от времени, $\hat{H} = \hat{H}(t)$. Как правило это связано с тем, что от времени зависит только возмущение $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$, а невозмущенный гамильтониан \hat{H}_0 остается постоянным. Возможны и такие ситуации, когда и $\hat{H}_0 = \hat{H}_0(t)$, но мы их здесь обсуждать не будем. При этом, в любом случае полный гамильтониан является эрмитовым оператором $\hat{H}^\dagger(t) = \hat{H}(t)$ и $[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] \neq 0$.

В прошлом семестре мы определили как зависит от времени квантовое среднее от произвольной наблюдаемой \hat{A} :

$$\langle \hat{A} \rangle(t) \equiv \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0) | \psi_0 \rangle, \quad (269)$$

где среднее значение в момент времени t_0 считается заданным, как начальное условие:

$$\langle \hat{A} \rangle(t_0) = \langle \psi_0 | \hat{A} | \psi_0 \rangle.$$

Иными словами $|\psi_0\rangle$ — это состояние квантовой системы в начальный момент времени. Напомним, что

$$\hat{U}(t, t_0) \equiv T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{H}(\tau) \right\}$$

— это оператор эволюции. Его основное свойство — это унитарность

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbf{1}}.$$

Также в прошлом семестре было рассказано, что можно выбрать два способа представления квантового среднего (269). Первый способ имеет следующий вид:

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle, \quad (270)$$

где

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0\rangle, \quad (271)$$

и соответственно:

$$i \hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle. \quad (272)$$

Это называется представлением Шреднигера, в котором от времени зависит состояние $|\Psi(t)\rangle$, а оператор, при этом, не меняется.

Второй способ записи следующий:

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi_0 | \hat{\mathcal{A}}(t) | \psi_0 \rangle, \quad (273)$$

где $\hat{\mathcal{A}}(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{A} \hat{U}(t, t_0)$ и, соответственно,

$$\frac{d\hat{\mathcal{A}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\mathcal{A}}(t)] + \frac{\partial \hat{\mathcal{A}}(t)}{\partial t}.$$

Это представление Гейзенберга, в котором от времени зависит оператор $\hat{\mathcal{A}}(t)$, а состояние, при этом, не меняется. Напомним, что второй вклад на правой стороне последнего соотношения возникает, если сам оператор \hat{A} явно зависит от времени: например, имеет вид $\hat{A} = t \hat{p}$.

Оба описанных способа представления квантового среднего очевидно эквивалентны, но не удобны для применения теории возмущений. Действительно, так как

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t_0) &\equiv T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau [\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)] \right\} \neq \\ &\neq e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)} \times T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}(\tau) \right\}, \end{aligned}$$

то оператор эволюции в таком представлении не удобно представлять в виде ряда по степеням \hat{V} .

Удобный для теории возмущений способ записи среднего (269) называется представлением взаимодействия и состоит в следующем. Запишем изменение вектора состояния во времени в виде:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I(t)\rangle, \quad (274)$$

где

$$\hat{U}_0(t-t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)}, \quad (275)$$

а $|\Psi_I(t)\rangle$ мы сейчас определим из решения нестационарного уравнения Шредингера. (Здесь индекс I происходит от слова Interaction — взаимодействие.) А именно, подставим (274) в нестационарное уравнение Шредингера (272) и воспользуемся тем, что $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$. Тогда получим:

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\partial_t \hat{U}_0(t-t_0) \right] |\Psi_I(t)\rangle + i\hbar \hat{U}_0(t-t_0) \partial_t |\Psi_I(t)\rangle = \\ = \left[\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right] \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I(t)\rangle. \end{aligned}$$

Теперь, используя соотношение

$$i\hbar \partial_t \hat{U}_0(t-t_0) = \hat{H}_0 \hat{U}_0(t-t_0),$$

следующее из определения $\hat{U}_0(t-t_0)$ в (275), преобразуем рассматриваемое уравнение в:

$$i\hbar \hat{U}_0(t-t_0) \partial_t |\Psi_I(t)\rangle = \hat{V}(t) \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I(t)\rangle.$$

Умножая обе стороны этого соотношения слева на $\hat{U}_0^+(t-t_0)$ и используя условие унитарности $\hat{U}_0^+(t-t_0) \hat{U}_0(t-t_0) = \hat{\mathbf{1}}$, получаем:

$$i\hbar \partial_t |\Psi_I(t)\rangle = \hat{V}_I(t) |\Psi_I(t)\rangle, \quad (276)$$

где

$$\hat{V}_I(t) \equiv \hat{U}_0^+(t-t_0) \hat{V}(t) \hat{U}_0(t-t_0). \quad (277)$$

Решение такого уравнения как (276) имеет вид:

$$|\Psi_I(t)\rangle = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau)} |\psi_0\rangle, \quad (278)$$

если $|\Psi(t)\rangle$, который определен в (274), в начальный момент равен $|\Psi(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle$, как мы условились выше.

Собирая вместе (274) и (278) и сравнивая их с (271), мы получаем замечательное соотношение:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}_0(t - t_0) \hat{U}_I(t, t_0), \quad \hat{U}_I(t, t_0) \equiv T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau)},$$

или

$$T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau [\hat{H}_0 + \hat{V}(\tau)]} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} \times T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau)}, \quad (279)$$

где \hat{V}_I определен в (277). В математической литературе полученное соотношение называется формулой Кембелла-Бейкера-Хаусдорфа.

В результате для квантового среднего (269) мы имеем (третье) представление взаимодействия:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle(t) &= \langle \Psi_I(t) | \hat{\mathcal{A}}_I(t) | \Psi_I(t) \rangle = \\ &= \langle \psi_0 | \hat{U}_I^+(t, t_0) \hat{\mathcal{A}}_I(t) \hat{U}_I(t, t_0) | \psi_0 \rangle = \\ &= \left(\langle \psi_0 | \hat{U}_I^+(t, t_0) \right) \left(\hat{U}_0^+(t - t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t - t_0) \right) \left(\hat{U}_I(t, t_0) | \psi_0 \right), \end{aligned} \quad (280)$$

где зависимость состояния от времени определяется из (278), то есть задается оператором \hat{V} в представлении взаимодействия. А зависимость всех операторов от времени, включая

$$\hat{\mathcal{A}}_I(t) \equiv \hat{U}_0^+(t - t_0) \hat{A} \hat{U}_0(t - t_0), \quad (281)$$

и $\hat{V}_I(t)$ из (277) определяется исключительно невозмущенным гамильтонианом \hat{H}_0 . То есть в представлении взаимодействия любой оператор \hat{O} решает уравнение:

$$\frac{d\hat{O}_I}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{O}_I(t)] + \frac{\partial \hat{O}_I(t)}{\partial t}. \quad (282)$$

Представление взаимодействия удобно тем, что в нем теперь есть отдельные экспоненты с $\hat{V}_I(t)$, которые удобно раскладывать в ряд Тейлора.

2. Обсуди кратко некоторые свойства и приложения формулы Кембелла–Бейкера–Хаусдорфа, которая в общей ситуации имеет вид:

$$\begin{aligned} & T \exp \left\{ \int_{t_0}^t d\tau \left[\hat{A}(\tau) + \hat{B}(\tau) \right] \right\} = \\ & = T \exp \left\{ \int_{t_0}^t d\tau \hat{A}(\tau) \right\} \times T \exp \left\{ \int_{t_0}^t d\tau \hat{B}_A(\tau) \right\} \end{aligned} \quad (283)$$

где

$$\hat{B}_A(\tau) \equiv \bar{T} e^{-\int_{t_0}^{\tau} d\tau' \hat{A}(\tau')} \hat{B}(\tau) T e^{\int_{t_0}^{\tau} d\tau' \hat{A}(\tau')}.$$

Напомним, что здесь \bar{T} означает анти- T -упорядочение (упорядочение обратно по времени), которое уже обсуждалось в прошлом семестре и содержится в $\hat{U}^+(t, t_0)$. В случае (279) мы имеем, что $\hat{A}(\tau) = -i \hat{H}_0/\hbar$ от времени не зависит, как мы условились выше, а $\hat{B}(\tau) = -i \hat{V}(\tau)/\hbar$.

Мы уже сталкивались с некоторыми упрощенными вариантами формулы Кембелла–Бейкера–Хаусдорфа. Например, пусть $\hat{A}(\tau)$ и $\hat{B}(\tau)$ не зависят от времени и $t_0 = 0$, а $t = 1$. Тогда T -экспоненты переходят в обычные, а из (283) мы получаем, что

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} \times T e^{\int_0^1 d\tau \hat{B}_A(\tau)}, \quad \hat{B}_A(\tau) \equiv e^{-\hat{A}\tau} \hat{B} e^{\hat{A}\tau}. \quad (284)$$

Если далее разложить $\hat{B}_A(\tau)$ по степеням \hat{A} , то мы получим, что

$$\hat{B}_A(\tau) = \hat{B} - [\hat{A}, \hat{B}] \tau + \dots$$

Тогда из (284) следует знакомое нам с прошлого семестра соотношение:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B} - \frac{[\hat{A}, \hat{B}]}{2} + \dots}.$$

Более того, если коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}] = c$, где c является числом, то $e^{\hat{A}}$ коммутирует с \hat{A} и \hat{B} (как в случае $\hat{A} = \hat{p}$ и $\hat{B} = \hat{q}$, например) то $\hat{B}_A(\tau) = \hat{B} - \tau c$ и формула (283) переходит в точное соотношение:

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{c}{2}},$$

о котором тоже упоминалось в прошлом семестре.

3. Используем теперь приобретенные знания для формулировки общих положений нестационарной теории возмущений. В таком случае постановка задачи несколько отличается от стационарного

случая. В нестационарной ситуации не имеет смысла искать уровни энергии. Однако теперь можно вычислять вероятности переходов между различными состояниями, которые тоже являются измеримыми на эксперименте величинами.

Заметим, что если возмущение \hat{V} и, соответственно, полный гамильтониан \hat{H} не зависят от времени, все полученные выше формулы очевидно остаются верными. В такой ситуации для поиска вероятностей переходов между состояниями тоже придется использовать нестационарную теорию возмущений.

Итак, для поиска вероятности перехода, разложим (278) по степеням возмущения:

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle = & \left[1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau) + \right. \\ & \left. + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t d\tau_1 \hat{V}_I(\tau_1) \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}_I(\tau_2) + \dots \right] |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (285)$$

Таким образом в первом порядке теории возмущений мы имеем поправку вида:

$$|\Psi_I^{(1)}(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau) |\psi_0\rangle,$$

а во втором:

$$|\Psi_I^{(2)}(t)\rangle = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t d\tau_1 \hat{V}_I(\tau_1) \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}_I(\tau_2) |\psi_0\rangle.$$

Заметим, при этом, что полная зависимость состояния от времени определяется как:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle = & \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I(t)\rangle = \\ = & \hat{U}_0(t-t_0) |\psi_0\rangle + \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I^{(1)}(t)\rangle + \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I^{(2)}(t)\rangle. \end{aligned}$$

Однако, сейчас мы увидим, что для определения вероятности перехода между собственными состояниями \hat{H}_0 нам не нужна полная временная эволюция, а достаточно только знания зависимости состояния от времени в представлении взаимодействия (285).

Действительно, рассмотрим следующую постановку задачи. Пусть в начальный момент времени t_0 система находится в каком-то собственном состоянии невозмущенного гамильтониана:

$$|\psi_0\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle, \quad \hat{H}_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle.$$

Мы подразумеваем пока, что спектр дискретный. Разложим точный вектор состояния $|\Psi(t)\rangle$ по базису собственных состояний \hat{H}_0 :

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t-t_0) |\Psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0(t-t_0) \sum_k a_k(t) |\psi_k^{(0)}\rangle.$$

Покажем, что $|a_k(t)|^2$ определяет вероятность обнаружить квантовую систему в состоянии $|\psi_k^{(0)}\rangle$ в момент времени t . (А заодно и вероятность того, что квантовое среднее наблюдаемой (269) при измерении окажется равным $\langle \psi_k^{(0)} | \hat{A} | \psi_k^{(0)} \rangle$, если $[\hat{A}, \hat{H}_0] = 0$ и $\psi_k^{(0)}$ общие вектора состояний \hat{H}_0 и \hat{A} .) Действительно, по определению

$$\begin{aligned} |a_k(t)| &= \left| \langle \psi_k^{(0)} | \Psi(t) \rangle \right| \equiv \\ &\equiv \left| e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)}(t-t_0)} \times \left\langle \psi_k^{(0)} \left| T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau) \right\} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|. \end{aligned}$$

Где мы воспользовались тем, что

$$\langle \psi_k^{(0)} | \hat{U}_0(t-t_0) = \langle \psi_k^{(0)} | e^{-\frac{i}{\hbar} E_k^{(0)}(t-t_0)}, \quad (286)$$

как следует из определения $\hat{U}_0(t-t_0)$ в (275), и тем, что $|\psi_0\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle$. Поэтому $\left| \langle \psi_k^{(0)} | \Psi(t) \rangle \right| = \left| \langle \psi_k^{(0)} | \Psi_I(t) \rangle \right|$. Соответственно,

$$|a_k(t)|^2 = \left| \left\langle \psi_k^{(0)} \left| T \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau) \right\} \right| \psi_n^{(0)} \right\rangle \right|^2. \quad (287)$$

То есть эта величина полностью определяется из $\langle \psi_k^{(0)} | \Psi_I(t) \rangle$.

Итак, вероятность перехода из начального состояния $|i\rangle \equiv |\psi_n^{(0)}\rangle$ в конечное $|f\rangle \equiv |\psi_k^{(0)}\rangle$ в первом порядке теории возмущений получается из (287) разложением экспоненты до первой степени по \hat{V}_I :

$$W_{fi}(t) \approx \left| a_{fi}^{(1)} \right|^2 \equiv \frac{1}{\hbar^2} \left| \left\langle f \left| \int_{t_0}^t d\tau \hat{V}_I(\tau) \right| i \right\rangle \right|^2, \quad (288)$$

если $\langle f|i \rangle = 0$. Подставим теперь в это уравнение выражение для \hat{V}_I из (277) и опять используем (286). Тогда получим, что

$$\begin{aligned} W_{fi}(t) &\approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t d\tau e^{i \frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar} \tau} \langle f | \hat{V}(\tau) | i \rangle \right|^2 \equiv \\ &\equiv \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t d\tau e^{i \omega_{fi} \tau} V_{fi}(\tau) \right|^2, \end{aligned} \quad (289)$$

где $\omega_{fi} \equiv (E_f^{(0)} - E_i^{(0)})/\hbar$ и $V_{fi}(\tau) \equiv \langle f | \hat{V}(\tau) | i \rangle$.

Наконец подчеркнем, что эти выражения можно получить и из интеграла по путям, если разложить ядро оператора эволюции в ряд Тейлора по степеням потенциальной энергии:

$$\begin{aligned} &K(t, t_0 | \vec{x}, \vec{y}) = \\ &= \int_{\vec{z}(t_0)=\vec{y}, \vec{z}(t)=\vec{z}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \left[\frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} - V(\vec{z}, \tau) \right] \right\} = \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \int_{\vec{z}(t_0)=\vec{y}, \vec{z}(t)=\vec{z}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} \right\} \times \\ &\quad \times \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau V(\vec{z}, \tau) \right)^N. \end{aligned} \quad (290)$$

Теперь надо вспомнить физический смысл ядра оператора эволюции и, что

$$\int_{\vec{z}(t_0)=\vec{y}, \vec{z}(t)=\vec{z}} \mathcal{D}\vec{z}(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{m \dot{\vec{z}}^2}{2} \right\} = \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 (t-t_0)} | \vec{y} \rangle.$$

Удобство формализма функционального интеграла по сравнению с операторным, который мы использовали выше, заключается в том, что теперь $V(\vec{z}, \tau)$ — это функция, а не оператор и не нужно следить за порядком множителей, как в (285). Читателю предлагается самостоятельно получить (289) из (290), с использованием свойств ядра оператора эволюции.

4. Обсудим теперь критерий применимости нестационарной теории возмущений. Очевидно, что для применимости этой теории поправка к невозмущенной волновой функции должна быть мала: $|\delta\psi| \ll 1$. На языке вероятностей переходов этот критерий, соответственно, выглядит так:

$$W_{fi} \ll 1, \quad (291)$$

то есть вероятности переходов должны быть малы. Рассмотрим ситуацию подробнее на примерах.

Пусть необходимо найти вероятность перехода при наложении периодического возмущения, которое начинает действовать с момента $t_0 = 0$ и имеет вид:

$$\hat{V}(t) = \hat{F}^- e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t}. \quad (292)$$

Тогда в (288)–(289) для амплитуды перехода в первом порядке теории возмущений получим:

$$\left| a_{fi}^{(1)}(t) \right| = \frac{1}{\hbar} \left| F_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)(t-t_0)} - 1}{\omega_{fi} - \omega} + F_{if}^* \frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)(t-t_0)} - 1}{\omega_{fi} + \omega} \right|, \quad (293)$$

где $F_{fi} \equiv \langle f | \hat{F} | i \rangle \equiv \langle \psi_k^{(0)} | \hat{F} | \psi_n^{(0)} \rangle$.

Теперь должно быть видно, что когда $\omega_{fi} \rightarrow \pm\omega$, то через достаточно длительный промежуток времени, $t - t_0 \rightarrow \infty$, наблюдается резонанс и критерий (291) очевидно нарушается. В такой ситуации, как мы увидим ниже, надо искать вероятность перехода в единицу времени.

Рассмотрим другой пример, когда возмущение $\hat{V}(t)$ действует в течении конечного времени T :

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} \hat{F}, & 0 \leq t \leq T \\ 0, & t < 0, \quad t > T, \end{cases} \quad (294)$$

и остается практически постоянным на рассматриваемом промежутке времени.

Тогда из (289) получаем для $t_0 = 0$, что:

$$W_{fi}(t) = \frac{4}{\hbar^2} |E_{fi}|^2 \begin{cases} \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} t}{2}\right)}{\omega_{fi}^2}, & t < T \\ \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} T}{2}\right)}{\omega_{fi}^2}, & t > T. \end{cases} \quad (295)$$

Видно, что в случае $t > T$ вероятность перехода зависит от продолжительности действия возмущения T , а не от текущего момента $t > T$.

Рассмотрим теперь различные пределы, при условии отсутствия резонанса $\pm\omega \neq \omega_{fi}$. Во втором примере (294)–(295) это означает, что $\omega_{fi} \neq 0$. Рассмотрим малый промежуток времени, $\omega_{fi} \Delta t \ll 1$, $\Delta t = t - t_0$. Тогда в (289) экспоненту под интегралом можно положить равной единице и пренебречь зависимостью $\hat{V}(t)$ от времени. В результате:

$$W_{fi} \approx \frac{|V_{fi}|^2 (\Delta t)^2}{\hbar^2}.$$

В таком случае критерий (291) можно сформулировать в виде условия $|V_{fi}| \Delta t \ll \hbar$.

Другой легко познаваемый пример — это когда $\hat{V}(t)$ меняется во времени медленно по сравнению с частотой перехода:

$$\left\| \frac{\partial \hat{V}}{\partial t} \right\| \ll \left\| \omega_{fi} \hat{V} \right\|.$$

Тогда на больших временах $\omega_{fi} t \gg 1$ матричный элемент V_{fi} можно вынести из под знака интеграла в (289) и получить, как в случае взятия интеграла методом стационарной фазы, что

$$W_{fi} \sim \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2},$$

что удовлетворяет критерию (291), если

$$|V_{fi}| \ll \hbar |\omega_{fi}| = |E_f - E_i|. \quad (296)$$

Это соотношение выглядит аналогично условию применимости стационарной теории возмущений.

Пусть теперь выполнено условие (296). Рассмотрим в этом случае выражение (295), которое мы тоже получили для постоянного \hat{V} , действующего в течении какого-то промежутка времени T . Из (295)

видно, что наибольшие значения вероятности приобретает на интервале времени $\omega_{fi} \Delta t \sim 1$ и фактически не зависит от формы $\hat{V}(t)$ при достаточно коротких Δt .

Ситуация оказывается аналогичной той, что мы имели, когда обсуждали соотношение неопределенностей для импульса и координаты. А именно, теперь мы получаем, что

$$|E_f - E_i| \Delta t \sim \hbar, \quad (297)$$

то есть, чем меньше выбранный интервал времени, Δt , тем выше вероятность перехода между уровнями с большой разницей в энергиях.

Это наблюдение можно применить к измерению в квантовой механике. А именно, при измерении мы воздействуем на квантовую систему некоторым возмущением \hat{V} в течении какого-то промежутка времени Δt . Под действием этого возмущения система может менять свое состояние. И чем короче действие возмущения, тем больше вероятность сильно изменить ее энергию. То есть мы получаем соотношение неопределенностей (297) для энергии и времени.

5. Рассмотрим теперь переходы вызванные возмущением, которое действует долго. А именно, пусть потенциал возмущения имеет вид:

$$\hat{V}(t) = \begin{cases} 0, & t \rightarrow -\infty \\ \hat{V}_0, & t \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (298)$$

Тогда амплитуда перехода из состояния $|i\rangle$ при $t \rightarrow -\infty$ в состояние $\langle f|$ в момент времени t в первом порядке теории возмущений определяется как:

$$a_{fi}^{(1)}(t) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t d\tau V_{fi}(\tau) e^{i\omega_{fi}\tau}, \quad (299)$$

с точностью до фазы. Интеграл в этом выражении формально расходится при $t \rightarrow +\infty$. Однако эта расходимость не физическая, что позволяет от нее избавиться. Действительно, возьмем рассматриваемый интеграл по частям:

$$a_{fi}^{(1)}(t) = - \left. \frac{V_{fi}(\tau) e^{i\omega_{fi}\tau}}{\hbar\omega_{fi}} \right|_{-\infty}^t + \int_{-\infty}^t d\tau \frac{e^{i\omega_{fi}\tau}}{\hbar\omega_{fi}} \frac{\partial V_{fi}(\tau)}{\partial \tau}.$$

Первое слагаемое на нижнем пределе ($\tau = -\infty$) равно нулю, а на верхнем ($\tau = t$) формально совпадает с поправкой первого порядка к временной части начальной волновой функции: Сравните этот вклад с поправкой первого порядке к вектору состояния в случае стационарной теории возмущений. По своему смыслу это слагаемое означает изменение вида волновой функции исходного состояния под воздействием постоянного возмущения. Следовательно первое слагаемое не имеет отношения к переходам между различными уровнями энергии. Поэтому, для нахождения вероятности перехода, его можно отбросить.

Таким образом, вероятность перехода в рассматриваемой ситуации следует определять как:

$$W_{fi} \approx \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_{-\infty}^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} \frac{\partial V_{fi}(\tau)}{\partial \tau} \right|^2. \quad (300)$$

Это выражение позволяет проанализировать отдельно два предельных случая: быстро (внезапно) или медленно (адиабатически) меняющиеся возмущения.

Возмущение меняется быстро, если характерное время изменения функции $V_{fi}(\tau)$, то есть $\Delta\tau$, намного меньше $1/|\omega_{fi}|$: $\Delta\tau \ll \left| \omega_{fi}^{-1} \right|$. В таком случае экспоненту под интегралом в (300) можно заменить на единицу и получить, что:

$$W_{fi} \approx \frac{|V_{fi}(t)|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2}.$$

Когда же возмущение меняется очень медленно, производная по времени под интегралом в (300) стремится к нулю. Поэтому, если в начальный момент времени система находилась в состоянии с невырожденным уровнем энергии из дискретного спектра, то соответственно вероятность перехода в состояние с другой энергией тоже стремится к нулю. То есть квантовая система остается в начальном состоянии, если оно невырождено и из дискретного спектра, а возмущение включается адиабатически. Обсудим это явление подробнее на немного более конкретном примере.

6. Обычно изменение возмущения \hat{V} и, соответственно, полного гамильтониана \hat{H} , обусловлено вариациями некоторого параметра. Например, внешнего электрического или магнитного поля. То есть пусть есть какой-то векторный параметр $\vec{\xi}_t$, от которого зависит полный гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}(\vec{\xi}_t)$. Это может быть и много параметров различной природы, но для определенности мы взяли один векторный.

Пусть \hat{H} в каждый момент времени при очень медленном изменении $\vec{\xi}_t$ имеет невырожденный дискретный спектр:

$$\begin{aligned}\hat{H}(\vec{\xi}_t) \left| \psi_n(\vec{\xi}_t) \right\rangle &= E_n(\vec{\xi}_t) \left| \psi_n(\vec{\xi}_t) \right\rangle, \\ \langle \psi_n(\vec{\xi}_t) | \psi_m(\vec{\xi}_t) \rangle &= \delta_{nm}.\end{aligned}\quad (301)$$

Поскольку мы решаем нестационарную задачу, то следует рассматривать нестационарное уравнение Шредингера:

$$i \hbar \partial_t \left| \Psi(t, \vec{\xi}_t) \right\rangle = \hat{H}(\vec{\xi}_t) \left| \Psi(t, \vec{\xi}_t) \right\rangle, \quad (302)$$

с начальным условием:

$$\left| \Psi(t=0, \vec{\xi}_0) \right\rangle = \left| \psi_0 \right\rangle,$$

где $|\psi_0\rangle$ — это любое из собственных состояний (301).

Решение нестационарного уравнения Шредингера (302) можно искать в виде:

$$\left| \Psi(t, \vec{\xi}_t) \right\rangle = \sum_m a_m(t) e^{-i \int_0^t d\tau \omega_m(\tau)} \left| \psi_m(\vec{\xi}_t) \right\rangle, \quad (303)$$

где $\omega_m = E_m(\vec{\xi}_t)/\hbar$ и $a_m(0) = \delta_{m0}$. Подставив это выражение в (302) и умножив получившееся в результате уравнение на $\langle \psi_n(\vec{\xi}_t) |$, получим:

$$\frac{da_n}{dt} + \dot{\vec{\xi}}_t \sum_{m \neq n} a_m(t) \langle \psi_n(\vec{\xi}_t) | \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} | \psi_m(\vec{\xi}_t) \rangle e^{-i \int_0^t d\tau \omega_{mn}(\tau)} = 0, \quad (304)$$

где

$$\omega_{mn}(t) = \frac{E_m(\vec{\xi}_t) - E_n(\vec{\xi}_t)}{\hbar}.$$

Сумма здесь берется по всем $m \neq n$. Действительно, поскольку волновые функции состояний невырожденного дискретного спектра всегда могут быть выбраны действительными, то для диагональных матричных элементов имеем:

$$\left\langle \psi_n(\vec{\xi}_t) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_n(\vec{\xi}_t) \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \left\langle \psi_n(\vec{\xi}_t) \left| \psi_n(\vec{\xi}_t) \right\rangle = 0.$$

Возникающие в (304) матричные элементы оператора $\partial/\partial \vec{\xi}_t$ можно получить из стационарного уравнения Шредингера (301), продифференцировав его по $\vec{\xi}_t$ и взяв соответствующее скалярное произведение:

$$\left\langle \psi_n(\vec{\xi}_t) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_m(\vec{\xi}_t) \right\rangle = \frac{1}{E_m(\vec{\xi}_t) - E_n(\vec{\xi}_t)} \left\langle \psi_n(\vec{\xi}_t) \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_m(\vec{\xi}_t) \right\rangle,$$

где мы использовали условие нормировки из (301).

Уравнение (304) можно решать по теории возмущений, то есть итерациями. А именно, в нулевом приближении имеем, что $a_m(0) = \delta_{m0}$. А в первом —

$$a_{n0}^{(1)} \approx \int_0^t d\tau \Phi(\tau) e^{-i \int_0^\tau d\tau' \omega_{0n}(\tau')}, \quad (305)$$

где

$$\Phi(\tau) = \dot{\vec{\xi}}_\tau \frac{\left\langle \psi_n(\vec{\xi}_\tau) \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{\xi}_\tau} \right| \psi_0(\vec{\xi}_\tau) \right\rangle}{E_n(\vec{\xi}_\tau) - E_0(\vec{\xi}_\tau)},$$

а второй индекс у $a_{n0}^{(1)}$ указывает на выбор начального состояния, которое не обязательно должно быть основным (с наименьшей энергией).

7. Обсудим теперь вероятность перехода в непрерывный спектр, то есть ситуацию, когда по крайней мере конечное состояние $\langle f |$ находится в непрерывном спектре. Тогда надо искать плотность вероятности перехода в некоторый интервал состояний $d\nu_f$ с энергией в промежутке $[E_f, E_f + dE_f]$. В этом случае вместо (289) в первом порядке теории возмущений мы имеем следующее определение плотности вероятности:

$$dW_{fi} \approx \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{t_0}^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} V_{fi}(\tau) \right|^2 d\nu_f. \quad (306)$$

Как правило в такой постановке задачи рассматривают переходы под действием периодического внешнего воздействия типа (292). А именно, пусть $t_0 \rightarrow -\infty$, а возмущение имеет вид:

$$\hat{V}(t) = \lim_{\gamma \rightarrow +0} \left(\hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t} \right) e^{\gamma t}, \quad (307)$$

так что при $t \rightarrow -\infty$ возмущение отсутствует $\hat{V}(t) \rightarrow 0$. Более того, так как $\gamma \rightarrow +0$, то возмущение очень медленно (адиабатически) включается начиная с минус бесконечности. Адиабатическое включение предполагается, чтобы исключить переходы между уровнями при резком начале воздействия возмущения, вроде тех случаев, которые были рассмотрены выше при обсуждении соотношения неопределенностей для энергии и времени.

Далее, для определенности будем считать, что $E_f > E_i$. Тогда, оставляя в (306) только резонансный вклад, первый из суммы в (293), мы получаем:

$$\begin{aligned} dW_{fi} &\approx \frac{1}{\hbar^2} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \left| \int_{-\infty}^t d\tau e^{i(\omega_{fi} - \omega)\tau + \gamma\tau} F_{fi} \right|^2 d\nu_f = \\ &= \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{e^{2\gamma t}}{(\omega_{fi} - \omega)^2 + \gamma^2} d\nu_f, \end{aligned} \quad (308)$$

где мы положили $t_0 = -\infty$, как было условлено выше.

Видно, что вероятность растет при $t \rightarrow \infty$. Это говорит о том, что в обсуждаемой ситуации по прошествии достаточно длительного времени система обязательно перейдет в другое состояние. Поэтому имеет смысл обсуждать, как быстро она это сделает. То есть надо искать не вероятность перехода вообще, а вероятность перехода в единицу времени:

$$dw_{fi} \equiv \frac{d}{dt} dW_{fi} \approx \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{2\gamma e^{2\gamma t}}{(\omega_{fi} - \omega)^2 + \gamma^2} d\nu_f.$$

Используя теперь одно из определений дельта-функции:

$$\lim_{\gamma \rightarrow +0} \frac{\gamma}{x^2 + \gamma^2} = \pi \delta(x),$$

получаем, что

$$\begin{aligned} dw_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} |F_{fi}|^2 \delta(\omega_{fi} - \omega) d\nu_f = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d\nu(E_f). \end{aligned} \quad (309)$$

Интервал состояний имеет вид:

$$d\nu(E_f) = \rho(E_f) dE_f,$$

где $\rho(E_f)$ — это плотность состояний в интервале энергий $[E_f, E_f + dE_f]$.

Таким образом, полная вероятность перехода в единицу времени получается интегрированием (309) по энергиям конечного состояния:

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \rho(E_f) \Big|_{E_f = E_i + \hbar\omega}. \quad (310)$$

Это выражение называется золотым правилом Ферми.

Х. Лекция. Фаза Берри, эффект Ааронова–Бома, взаимодействие атомов с классическим электромагнитным полем, квазистационарные состояния, борновское приближение, функция Грина для борновского приближения.

1. На этой лекции мы обсудим несколько примеров применения нестационарной и стационарной теории возмущений. Начнем мы с так называемой фазы Берри и эффекта Ааронова–Бома.

Эволюцию состояния под действием очень медленно (адиабатически) меняющегося возмущения можно с экспоненциальной точностью записать в следующем виде:

$$\left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle = a_0(t) e^{-i \int_0^t d\tau \omega_0(\tau)} \left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle, \quad (311)$$

как мы обсудили на прошлой лекции. Здесь предполагается, что из-за адиабатичности изменения внешнего возмущения, переходы на другие уровни подавлены. Напомним, что $\omega_0(t) = E_0 \left(\vec{\xi}_t \right) / \hbar$ и

$$\hat{H}_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle = E_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle,$$

где индекс 0 у ψ и E означает не основное состояние, а начальное — любое собственное оператора \hat{H}_0 .

Поскольку состояние $\left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle$ нормировано, то

$$a_0(t) = e^{i\gamma(t)}, \quad (312)$$

где $\gamma(t)$ — действительная функция, называемая фазой Берри. Наша задача здесь определить ее. Подставляя (312) в (311) и применяя производную по времени, получаем, что:

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle &= \hbar \left[-\dot{\gamma}(t) + \omega_0(t) \right] \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle + \\ &+ i \hbar e^{i\gamma(t)} e^{-i \int_0^t d\tau \omega_0(\tau)} \left(\dot{\vec{\xi}}_t \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right) \left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (313)$$

Возникающую здесь производную от начального состояния по $\partial/\partial \vec{\xi}_t$ в адиабатическом приближении можно представить как:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle &= \sum_n \left| \psi_n \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle \left\langle \psi_n \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle \approx \\ &\approx \left\langle \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle \left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle, \end{aligned}$$

если пренебречь переходами между уровнями. Таким образом, с учетом того, что

$$\hat{H}_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \psi_n \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle = E_n \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \psi_n \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle,$$

уравнение (313) принимает вид:

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle &\approx \left[-\hbar \dot{\gamma}(t) + E_0 \left(\vec{\xi}_t \right) + \right. \\ &\left. + i \hbar \dot{\vec{\xi}}_t \left\langle \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle \right] \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle, \end{aligned} \quad (314)$$

где $\hbar \omega_0(t) = E_0 \left(\vec{\xi}_t \right)$. Но так как, из-за адиабатичности внешнего воздействия, состояние $\left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle$ имеет ту же энергию $E_0 \left(\vec{\xi}_t \right)$, что и начальный вектор $\left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle$, то

$$i \hbar \partial_t \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle = \hat{H}_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle = E_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \Psi \left(t, \vec{\xi}_t \right) \right\rangle.$$

Следовательно, из уравнения (314) получаем, что

$$\dot{\gamma}(t) = i \dot{\vec{\xi}}_t \left\langle \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle, \quad (315)$$

что и определяет фазу Берри. Легко видеть, что $\dot{\gamma}(t)$ является действительной функцией и определяется фазой вектора состояния $\left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle$.

А именно, если $\langle x | \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \rangle = \psi_0 \left(\vec{x}, \vec{\xi}_t \right)$ является действительной функцией, то $\dot{\gamma}(t) = 0$, так как:

$$\left\langle \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle = \int d^3 \vec{x} \left\langle \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| x \right\rangle \langle x \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle =$$

$$= \frac{1}{2} \int d^3 \vec{x} \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \left[\psi_0 \left(\vec{x}, \vec{\xi}_t \right) \right]^2 = \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \frac{1}{2} \int d^3 \vec{x} \left[\psi_0 \left(\vec{x}, \vec{\xi}_t \right) \right]^2 = 0.$$

Далее, при изменении фазы начального состояния $\left| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle$ функция $\dot{\gamma}(t)$ меняется сдвигом на производную, как компонента калибровочного поля:

$$e^{i \alpha \left(\vec{\xi}_t \right)} \psi_0 \left(\vec{x}, \vec{\xi}_t \right) \rightarrow \dot{\gamma} = \dot{\vec{\xi}}_t \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \alpha \left(\vec{\xi}_t \right) = \partial_t \alpha \left(\vec{\xi}_t \right).$$

Это нетрудно увидеть из ее определения (315). То есть фаза Берри определена неоднозначно.

Пусть, наконец, параметр $\vec{\xi}_t$ вращается или осциллирует с периодом T , описывая замкнутую траекторию в параметрическом пространстве. Тогда изменение фазы за период можно выразить через интеграл по замкнутому контуру C в пространстве параметров ξ_t . При этом полное изменение фазы за период равно:

$$\begin{aligned} \gamma &= \int_0^T dt \dot{\gamma}(t) = i \oint_C d\vec{\xi}_t \left\langle \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \left| \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \right| \psi_0 \left(\vec{\xi}_t \right) \right\rangle = \\ &= \oint_C d\vec{\xi}_t \frac{\partial}{\partial \vec{\xi}_t} \alpha \left(\vec{\xi}_t \right) = \oint d\alpha = 2 \pi N, \end{aligned}$$

то есть является калибровочно инвариантной величиной. Здесь N целое число, которое считает число раз окружность в пространстве $\vec{\xi}_t$ накрывает окружность в пространстве α . Последняя величина — это фаза волновой функции, которая меняется периодически.

2. Одним из наиболее ярких явлений связанных с фазой Берри является эффект Ааронова–Бома. Рассмотрим электроны двигающиеся в окрестности очень длинного и узкого соленоида, в котором есть магнитное поле. Вдали от концов соленоида и в его окрестности магнитное поле равно нулю $\vec{B} = 0$, кроме его внутренности, конечно. А также очевидно, что равно нулю и электрическое поле $\vec{E} = 0$. Однако электромагнитный вектор потенциал за пределами соленоида не равен нулю $\vec{A} \neq 0$. Действительно, если магнитное поле направлено вдоль оси z , ($\vec{B} = (0, 0, B)$), то поток через плоскость (x, y) определяется как

$$0 \neq \Phi \equiv \int \int_M dx dy B = \int \int_M \left(d^2 \vec{S}, \left[\vec{\partial} \times \vec{A} \right] \right) = \oint_C \vec{A} d\vec{r}, \quad (316)$$

где C — это любой контур, который окружает соленоид. Он является границей области M в плоскости (x, y) , которую пересекает соленоид. Заметим, что вне соленоида вектор потенциал является чистой калибровкой $\vec{A} = \vec{\partial}\alpha$, так как там магнитное поле равно нулю. Поэтому

$$\Phi = \oint d\vec{r} \vec{\partial}\alpha = \oint d\alpha.$$

Как мы знаем, гамильтониан электрона снаружи соленоида, если забыть про взаимодействие его спина с магнитным полем, имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\vec{P}} - \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2}{2m}, \quad \varphi = 0, \quad \text{rot} \vec{A} = \vec{B} = 0.$$

Поле \vec{A} , как мы тоже знаем, можно убрать из гамильтониана калибровочным преобразованием с параметром:

$$\alpha(\vec{x}) = \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A} d\vec{r},$$

где \vec{x}_0 — произвольная точка за пределами соленоида и контур интегрирования в этом интеграле произвольный, но не пересекает соленоида. Мы знаем, что при таком преобразовании изменится и фаза волновой функции следующим образом:

$$\psi(\vec{x}) \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c} \alpha(\vec{x})} \psi(\vec{x}). \quad (317)$$

В результате, в системе отсчета достаточно медленнодвигающегося по траектории $\vec{z}(t)$ электрона получится, что фаза Берри равна

$$\gamma(t) = \frac{e}{\hbar c} \alpha[\vec{z}(t)], \quad (318)$$

а роль параметра ξ_t здесь играет $\vec{A}[\vec{z}(t)]$. С присутствием этой фазы и связано явление Ааронова–Бома, которое было обнаружено экспериментально. А именно, из-за наличия фазы (317) и (318) возникнет изменение интерференционной картины, если добавить в двухщелевой эксперимент соленоид, как изображено на рис. 17.

Если магнитное поле в соленоиде отсутствует, $\vec{B} = 0$, то интерференционная картина имеет стандартный вид. Если же поле не равно нулю, то картина меняется за счет набега разных фаз при прохождении с одной стороны соленоида и с другой его стороны. Разность фаз как раз и равна

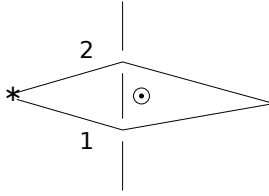


Рис. 17:

$$\frac{e}{\hbar c} \oint_C \vec{A} d\vec{r} = \frac{e}{\hbar c} \Phi,$$

где контур C является совокупностью двух путей на рис. 17.

3. Рассмотрим теперь задачу о возбуждении состояния сложного атома полем электромагнитной волны. Начнем с рассмотрения одной плоской монохроматической волны с волновым вектором \vec{k} . В такой волне, как мы знаем, векторы \vec{B} , \vec{E} и \vec{k} все друг другу перпендикулярны. Из курса теории поля мы знаем, что в такой ситуации удобно выбрать калибровку $\varphi = 0$ и $\text{div} \vec{A} = 0$ и

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{A}}, \quad \vec{B} = \frac{1}{c} [\dot{\vec{A}} \times \vec{n}],$$

где $\vec{n} = \vec{k}/k$. Существенные для рассматриваемой задачи вклады в гамильтониан сложного атома имеют вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{|e|}{mc} \sum_a \left(\vec{A}[\vec{x}_a, t], \hat{P}_a \right) + 2\mu_0 \sum_a \left(\hat{s}_a, \vec{B}[\vec{x}_a, t] \right) + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \left(\vec{A}[\vec{x}_a, t] \right)^2, \quad (319)$$

где \hat{H}_0 — стандартный невозмущенный гамильтониан, а сумма ведется по всем электронам в атоме. Единственная разница здесь с ситуациями, которые рассматривались до сих пор — это то, что теперь внешнее электромагнитное поле зависит от времени.

Взаимодействие поля со спином имеет порядок

$$\mu_0 |\vec{B}| \sim \frac{1}{c^2} |\dot{\vec{A}}| \sim \frac{k}{c} |\vec{A}|.$$

Это значит, что соответствующим вкладом, а также и последним слагаемым в (319) можно пренебречь при условии, что оставшийся член

в \hat{V} дает отличную от нуля поправку в первом порядке теории возмущений.

Вектор потенциал для плоской линейно поляризованной монохроматической волны имеет вид:

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \text{Re } \vec{A}_\omega e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{x}}. \quad (320)$$

Для видимой части спектра $\omega \sim 10^{15} 1/\text{сек}$, и соответственно $k \sim 10^{-5} \text{см}$. (Обычно в спектроскопии используют видимый свет.) Поэтому в области пространства порядка атомных размеров поле электромагнитной волны можно считать однородным, то есть пренебречь $\vec{k}\vec{x}$ в экспоненте в (320). Это же приближение применялось и в курсе теории поля при изучении рассеяния электромагнитных волн.

Итак, пусть в начальный момент времени атом находится в каком-то состоянии $|i\rangle$ с энергией E_i . Нас интересует переход в состояние $|f\rangle$ с энергией E_f под действием возмущения вида:

$$\hat{V} = \frac{|e|\hbar}{m c} \sum_a \left(\hat{P}_a, \vec{A}[t] \right). \quad (321)$$

Как было показано на прошлой лекции, вероятность перехода в первом порядке теории возмущений определяется по формуле:

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} V_{fi}(\tau) \right|^2, \quad (322)$$

где $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$, которая в случае (321) приводит к выражению вида:

$$W_{fi} = \left(\frac{e}{\hbar m c} \right)^2 \left| \sum_a \int_0^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} \left(\langle f | \hat{P}_a | i \rangle, \vec{A}[\tau] \right) \right|^2 \quad (323)$$

Матричный элемент \hat{P}_a можно найти, если выразить его через производную по времени от оператора координаты в нулевом приближении теории возмущений:

$$\hat{P}_a = m \frac{d\hat{q}_a}{dt} = \frac{i m}{\hbar} [\hat{H}_0, \hat{q}_a].$$

Тогда

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{P}_a | i \rangle &= \frac{i m}{\hbar} \langle f | \hat{H}_0 \hat{q}_a - \hat{q}_a \hat{H}_0 | i \rangle = \\ &= \frac{i m}{\hbar} (E_f - E_i) \langle f | \hat{q}_a | i \rangle = i m \omega_{fi} \langle f | \hat{q}_a | i \rangle. \end{aligned}$$

Учтем теперь, что $\sum_a e \hat{q}_a = \hat{d}_a$ — это оператор электрического дипольного момента атома.

В результате из (323) получаем, что

$$W_{fi} = \frac{\omega_{fi}^2}{\hbar^2 c^2} \left| \int_0^t d\tau e^{i\omega_{fi}\tau} (\vec{d}_{fi}, \vec{A}[\tau]) \right|^2, \quad (324)$$

где $\vec{d}_{fi} \equiv \langle f | \hat{d} | i \rangle$. То есть мы буквально пришли к задаче на нахождение вероятности перехода под действием периодического возмущения вида:

$$\hat{V} = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t}.$$

Действительно, обратите внимание на вид вектор потенциала (320) с $\vec{k} \vec{x} \rightarrow 0$. Мы такую ситуацию рассматривали на прошлой лекции.

Также как и в ситуации рассмотренной на прошлой лекции, при $\omega = \pm\omega_{fi}$ мы получаем резонанс. Если $E_f > E_i$, то происходит резонансное возбуждение атома — переход на более высокий уровень энергии; иначе — релаксация на нижний уровень.

Как объяснялось на прошлой лекции, в условиях резонанса переход обязательно произойдет и имеет смысл обсуждать не полную вероятность, а вероятность перехода в единицу времени. Помимо этого, в реальной ситуации на атом падает не монохроматическая волна, а пакет из волн разной частоты:

$$\vec{A}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \vec{A}_\omega e^{-i\omega t}.$$

Подставляя это выражение в (324) и беря интеграл по $d\tau$, мы получаем, что

$$W_{fi}^\pm = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega W_{fi}^\pm(\omega), \quad (325)$$

где

$$W_{fi}^{\pm}(\omega) = \left(\frac{\omega f_i}{\hbar c}\right)^2 |A_{\omega}|^2 \left| \left(\vec{d}_{fi}, \vec{e} \right) \right|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{(\omega_{fi} \pm \omega) t}{2} \right]}{(\omega_{fi} \pm \omega)^2}, \quad (326)$$

где мы взяли интеграл по τ и оставили один из резонансных вкладов, а также мы ввели обозначение $\vec{A}_{\omega} = A_{\omega} \vec{e}$, а \vec{e} — это единичный вектор поляризации.

Выразим теперь $|A_{\omega}|$ через интенсивность излучения. Как мы знаем из курса теории поля, полная интенсивность электромагнитной волны равна:

$$I = \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \vec{E}^2(t). \quad (327)$$

Если подставить в эту формулу спектральное разложение поля:

$$\vec{E}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t} \vec{E}_{\omega}, \quad (328)$$

то получится следующее выражение:

$$\begin{aligned} I &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} e^{i\omega_1 t} \vec{E}_{\omega_1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} e^{i\omega_2 t} \vec{E}_{\omega_2} = \\ &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \vec{E}_{\omega_1} \vec{E}_{\omega_2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega_1 + \omega_2) t} = \\ &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \vec{E}_{\omega_1} \vec{E}_{\omega_2} \delta(\omega_1 + \omega_2) = \\ &= \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \vec{E}_{\omega} \vec{E}_{-\omega}. \end{aligned}$$

При этом, так как $\vec{E}^*(t) = \vec{E}(t)$, то из (328) следует, что $\vec{E}_{\omega}^* = \vec{E}_{-\omega}$. Поэтому, получаем, что

$$I = \frac{c}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \left| \vec{E}_{\omega} \right|^2 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I(\omega). \quad (329)$$

Теперь вспомним, что

$$\vec{E}_\omega = -\frac{1}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = -\frac{i\omega}{c} \vec{A}_\omega, \quad (330)$$

где мы взяли интеграл по частям. Таким образом, из (329) и (330) следует, что

$$\left| \vec{A}_\omega \right|^2 = |A_\omega|^2 = \frac{4\pi c}{\omega^2} I(\omega). \quad (331)$$

Собирая все вместе и используя последнюю формулу, для полной вероятности (325), (326) мы получаем следующее выражение:

$$W_{fi}^\pm(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{4\pi\omega_{fi}^2}{c\hbar^2\omega^2} I(\omega) \left| \left(\vec{d}_{fi}, \vec{e} \right) \right|^2 \frac{\sin^2 \left[\frac{(\omega_{fi} \pm \omega)t}{2} \right]}{(\omega_{fi} \pm \omega)^2}. \quad (332)$$

Определим теперь вероятность перехода в единицу времени как:

$$w_{fi} \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_{fi}(t)}{t}, \quad (333)$$

а затем воспользуемся следующим представлением δ -функции

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 [\Delta\omega t]}{\Delta\omega^2 t} = 2\pi \delta(\Delta\omega). \quad (334)$$

Таким образом, мы получаем окончательный ответ:

$$w_{fi}^\pm = \frac{8\pi^2}{\hbar^2 c} I(\pm\omega_{fi}) \left| \left(\vec{d}_{fi}, \vec{e} \right) \right|^2, \quad (335)$$

где на последнем шаге мы взяли интеграл по ω с использованием $\delta(\omega_{fi} \pm \omega)$. В этом выражении знак “+” относится к переходу на более высокий уровень энергии, то есть — к возбуждению атома с поглощением энергии электромагнитной волны. А знак “−” относится к переходу на более низкий уровень энергии, то есть с испусканием электромагнитной волны.

Из соотношения (331) следует, что $I(-\omega) = I(\omega)$, а поэтому вероятности поглощения и индуцированного излучения классической

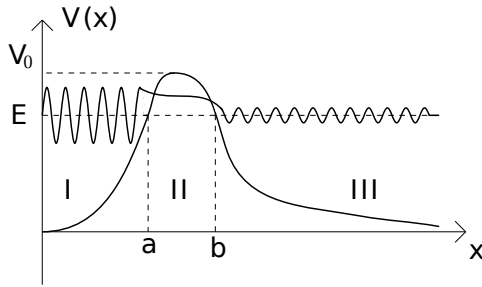


Рис. 18:

электромагнитной волны равны друг другу: $w_{fi}^+ = w_{fi}^-$. Однако взаимодействие системы зарядов с квантовым электромагнитным полем приводит к появлению вклада в w_{fi}^- связанного со спонтанным излучением. Поэтому полная вероятность перехода в единицу времени с излучением электромагнитных волн оказывается выше вероятности поглощения на величину зависящую от интенсивности излучения. Мы рассмотрим это явление на одной из следующих лекций.

4. Обсудим теперь на примере такое явление как квазистационарные состояния. Пусть задача (эффективно) одномерная и потенциал в ней имеет такой вид, как изображено на рис. 18. Эта ситуация моделирует, например, радиационный распад.

Пусть $E < V_0$ и вероятность туннелирования направо экспоненциально мала, то есть применимо квазиклассическое приближение. Если вообще пренебречь туннелированием, то в яме слева будут стационарные уровни дискретного спектра, при условии достаточной ее глубины. С учетом же туннелирования спектр состояний в яме вроде должен быть непрерывным.

Мы знаем, однако, что внутри барьера амплитуда волновой функции убывает. Поэтому, если нас интересует решение убегающее от барьера вправо, то в зоне III волновая функция имеет вид:

$$\psi_{III} \sim e^{-\int_a^b dx |p(x)|} e^{i k x} \equiv D e^{i k x}.$$

При этом внутри ямы вектор состояния определяется как:

$$\psi_I \sim e^{i k x} + e^{-i k x},$$

где $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$. Можно убедиться, что для сшивания волновой функции потребуются, чтобы E принимало комплексные значения: $E =$

$E_i - i \hbar \gamma / 2$. Такое поведение волновой функции в зоне I означает, что вероятностью остаться в яме меньше единицы: $W = |\psi|^2 < 1$.

Это явление можно увидеть на еще более простом примере. А именно, для потенциала вида: $V = +\infty$, при $x \leq 0$ и $V(x) = \alpha \delta(x - a)$, $\alpha > 0$, $a > 0$ при $x > 0$.

Посмотрим как подобное явление будет выглядеть в несколько иной постановке задачи. А именно, пусть квант находится в яме. Разложим начальное состояние по собственным функциям непрерывного спектра:

$$\psi_i(x) = \int_0^\infty dE \alpha(E) \psi_E(x), \quad \int_0^\infty dx \psi_{E'}^*(x) \psi_E(x) = \delta(E - E'). \quad (336)$$

Подчеркнем, что ψ_i не является собственной функцией гамильтониана. Она описывает квант находящийся под таким барьером, как на рис. 18. И у нее асимптотика на бесконечности описывается убегающей волной.

Эволюция волновой функции со временем t и с указанным начальным условием ψ_i имеет вид:

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty dE \alpha(E) \psi_E(x) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (337)$$

Амплитуда нахождения частицы внутри ямы в произвольный момент времени определяется как:

$$a(t) = \int_0^\infty dx \Psi^*(x, t) \psi_i(x) = \int_0^\infty dE |\alpha(E)|^2 e^{-\frac{iEt}{\hbar}}, \quad (338)$$

где мы подставили разложения (336) и (337) и взяли интеграл по dx . А затем убрали одно из интегрирований по энергиям с использованием условия нормировки в (336).

Как мы обсудили выше, из-за туннелирования мы имеем, что $W(t) = |a(t)|^2 < 1$. Вопрос в том какие свойства должна иметь функция $\alpha(E)$, чтобы выполнялся закон:

$$W \propto e^{-\gamma t}, \quad (339)$$

который был открыт в начале XX века для радиационного распада. Оказывается, что для этого необходимо, чтобы $\alpha(E)$ имела следующий вид:

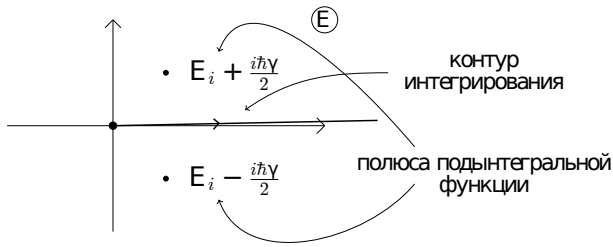


Рис. 19:

$$\alpha(E) = \frac{\sqrt{\frac{\hbar\gamma}{2\pi}}}{E - (E_i - i\hbar\frac{\gamma}{2})}. \quad (340)$$

Действительно, тогда

$$a(t) = \int_0^\infty dE \frac{\hbar\gamma}{2\pi} \frac{e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}{(E - E_i)^2 + \frac{\hbar^2\gamma^2}{4}}. \quad (341)$$

Здесь надо взять интеграл по контуру в комплексной плоскости E , который изображен на рис. 19.

Продеформируем этот контур так, как изображено на рис. 20. Так как при такой деформации мы пересекаем полюс в $E = E_i - i\hbar\frac{\gamma}{2}$, то

$$\int_0^\infty = \int_{C'} - \text{res}_{E_i - i\hbar\frac{\gamma}{2}}.$$

Теперь нетрудно видеть, что, если нижнюю горизонтальную часть контура C' опустить далеко вниз, то вклад от нее в интеграл будет стремиться к нулю, так как: $\exp[-\text{Im}Et/\hbar] \rightarrow 0$. В результате из (341) с точностью до фазы мы получаем, что

$$a(t) = e^{-\frac{iE_it}{\hbar} - \frac{\gamma t}{2}} - i \int_0^\infty dz \left| \alpha(-iz) \right|^2 e^{-zt}, \quad (342)$$

где первый вклад возникает от полюса в $E = E_i - i\hbar\frac{\gamma}{2}$, а во втором сделана замена $E = -iz$, что отвечает контуру C' , идущему вниз вдоль мнимой оси на рис. 20.

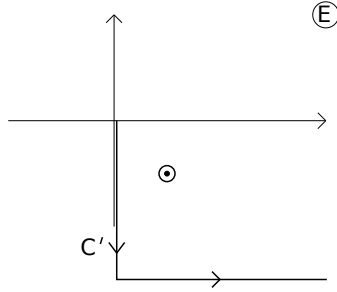


Рис. 20:

На достаточно коротких временах наблюдения вторым вкладом в (342) можно пренебречь. Тогда $W(t) = |a(t)|^2 \approx e^{-\gamma t}$, что как раз описывает закон вроде радиационного распада. Отметим, что γ определяется $|D|^2$ — вероятностью туннелирования, которая возникла в первой постановке задачи.

5. Мы закончим наше обсуждение теории возмущений рассмотрением общих положений так называемого борновского приближения в теории рассеяния. В этой задаче \hat{H}_0 отвечает свободной частице. Поэтому для начала найдем функцию Грина для стационарного уравнения Шредингера свободного кванта:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - E \right) G_0(\vec{x}, \vec{y}) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}), \quad E > 0. \quad (343)$$

В силу трансляционной инвариантности этого уравнения, его решение должно иметь вид $G_0(\vec{x}, \vec{y}) = G_0(\vec{x} - \vec{y})$. Разложим $G_0(\vec{x} - \vec{y})$ и $\delta(\vec{x} - \vec{y})$ в интеграл Фурье по собственным функциям \hat{H}_0 :

$$G_0(\vec{x} - \vec{y}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})} G_0(\vec{k}), \quad \delta(\vec{x} - \vec{y}) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{y})}.$$

Тогда из (343) получаем, что

$$\left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - E \right) G_0(\vec{k}) = 1.$$

И, соответственно,

$$G_0(\vec{x} - \vec{y}) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{x} - \vec{y})}}{\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - E}. \quad (344)$$

Последнее уравнение имеет характерный вид

$$G_0(\vec{x} - \vec{y}) = \int d\nu \frac{\psi_\nu^{(0)*}(\vec{x}) \psi_\nu^{(0)}(\vec{y})}{E_\nu^{(0)} - E},$$

где в рассматриваемом случае $\nu \leftrightarrow \vec{k}$, а

$$\psi_\nu^{(0)}(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{p}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

— собственные функции \hat{H}_0 .

Такое выражение для функции Грина легко получить для невозмущенного гамильтониана общего вида, если его спектр непрерывный. А именно, если

$$(\hat{H}_0 - E) \hat{G}_0 = \hat{\mathbf{1}},$$

то

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \hat{G}_0 | \vec{y} \rangle &= \langle \vec{x} | \frac{1}{\hat{H}_0 - E} | \vec{y} \rangle = \\ &= \int d\nu \int d\nu' \langle \vec{x} | \psi_\nu^{(0)} \rangle \langle \psi_{\nu'}^{(0)} | \frac{1}{\hat{H}_0 - E} | \psi_{\nu'}^{(0)} \rangle \langle \psi_{\nu'}^{(0)} | \vec{y} \rangle = \\ &= \int d\nu \int d\nu' \psi_\nu^{(0)*}(\vec{x}) \frac{\langle \psi_{\nu'}^{(0)} | \psi_{\nu'}^{(0)} \rangle}{E_{\nu'}^{(0)} - E} \psi_{\nu'}^{(0)}(\vec{y}) = \int d\nu \frac{\psi_\nu^{(0)*}(\vec{x}) \psi_\nu^{(0)}(\vec{y})}{E_\nu^{(0)} - E}, \end{aligned}$$

где использовалось, что

$$\int d\nu |\psi_\nu^{(0)}\rangle \langle \psi_\nu^{(0)}| = \hat{\mathbf{1}}, \quad \langle \psi_\nu^{(0)} | \psi_{\nu'}^{(0)} \rangle = \delta(\nu - \nu').$$

Однако, как мы сейчас увидим, интеграл в (344) требует доопределения. Действительно, перейдем в (344) к сферическим координатам в пространстве волновых векторов $\vec{k} = (k, \theta, \varphi)$. Как обычно считаем, что третья координата, k_z , направлена вдоль \vec{x} . Тогда:

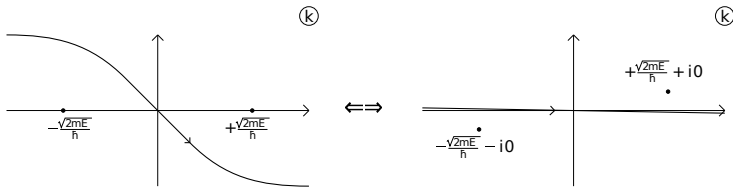


Рис. 22:

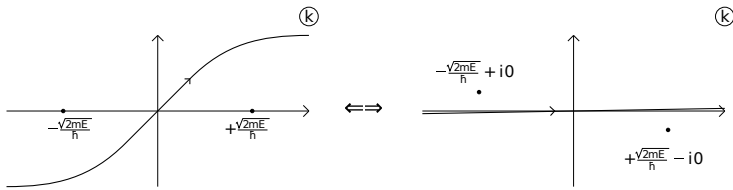


Рис. 23:

$$k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} - i0 = 0, \quad k = \pm \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + i0 \right).$$

Выбор же контура C_4 , который изображен на рис. 23, отвечает полюсам в точках:

$$k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} + i0 = 0, \quad k = \pm \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - i0 \right).$$

Для таких двух контуров в (345) мы имеем две возможности, которые нам интересны для обсуждения задачи рассеяния в борновском приближении:

$$G_0^\pm(\vec{x}) = \frac{2m}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar^2 i r} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{k e^{i k r}}{k^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} \pm i0}. \quad (346)$$

Учитывая знак в экспоненте под интегралом, и то, что $r \equiv |\vec{x}| > 0$, контур по лемме Жордана надо замыкать большой полуокружностью в верхней полуплоскости. Добавление к (346) интеграла вдоль такой полуокружности его не меняет, ведь на ней подынтегральное выражение равно нулю.

Таким образом, взяв интегралы в (346) по теореме Коши, мы имеем два варианта для функции Грина:

$$G_0^\pm(\vec{x}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{\pm i\sqrt{2mE}r}}{r}. \quad (347)$$

Здесь знак “+” отвечает расходящейся из центра $r = 0$ сферической волне, тогда как знак “−” — сходящейся. Выбор же контуров C_1 или C_2 дает либо ноль, либо линейную комбинацию двух таких сферических волн. Эти контуры отвечают решениям однородного уравнения.

6. Обсудим теперь применение одной из найденных функций Грина (347) в задаче рассеяния в борновском приближении. Рассмотрим такое решение стационарного уравнения Шредингера:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x}) = E \psi(\vec{x}), \quad (348)$$

которое имеет вид:

$$\psi(\vec{x}) = A e^{i\vec{k}\vec{x}} - \int d^3\vec{y} G_0^+(\vec{x} - \vec{y}) V(\vec{y}) \psi(\vec{y}),$$

где $A e^{i\vec{k}\vec{x}}$ решает невозмущенное уравнение Шредингера, с $V = 0$, то есть $|\vec{k}| = \sqrt{2mE}/\hbar$ и описывает плоскую волну; A — константа, которая определяет поток вероятности в падающей волне. Мы уже сталкивались с решениями уравнения Шредингера подобного вида, когда только начинали обсуждать стационарную теорию возмущений. Действительно, если применить оператор $\frac{\hat{p}^2}{2m} - E$ к такой $\psi(\vec{x})$, то мы получим, что:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - E \right) \psi(\vec{x}) &= 0 - \int d^3\vec{y} \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} - E \right) G_0^+(\vec{x} - \vec{y}) V(\vec{y}) \psi(\vec{y}) = \\ &= \int d^3\vec{y} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) V(\vec{y}) \psi(\vec{y}) = V(\vec{x}) \psi(\vec{x}), \end{aligned}$$

что совпадает с (348).

Таким образом, используя (347) со знаком “+” и делая замену $\vec{x} = \vec{R}$ и $\vec{y} = \vec{r}$, получим:

$$\psi(\vec{R}) = A e^{i\vec{k}\vec{R}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r} \frac{e^{i\vec{k}|\vec{R}-\vec{r}|}}{|\vec{R}-\vec{r}|} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \quad (349)$$

Такое представление решения уравнения Шредингера имеет непосредственное отношение к задаче рассеяния на потенциале $V(\vec{r})$. А именно, рассмотрим упругое рассеяние кванта на каком-нибудь $V(\vec{r})$. В процессе рассеяния его энергия не меняется. Поэтому модуль волнового вектора $|\vec{k}| = \sqrt{2mE}/\hbar$ сохраняется, но может менять направление после рассеяния: $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$, $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = k$. Заметим, что, так как энергия не меняется, то при решении нестационарной задачи рассеяния мы можем использовать стационарное уравнение Шредингера и рассматривать суперпозицию падающей и рассеянной волны.

В такой ситуации $A e^{i\vec{k}\vec{x}}$ описывает падающий на рассеивающий центр квант, а дополнительный вклад в (349) — расходящуюся из центра рассеянную на потенциале $V(\vec{r})$ сферическую волну вероятности. То есть в (349) мы имеем суперпозицию двух состояний с одинаковой энергией.

Пусть потенциал $V(\vec{r}) \neq 0$ только в какой-то области $|\vec{r}| \leq a$ и равен нулю вне ее. Когда изучается рассеяния квантов, их наблюдают далеко от рассеивающего центра — при $|\vec{R}| \rightarrow \infty$ в единицах a . Тогда под интегралом в (349) имеется следующее соотношение шкал расстояний $|\vec{r}| \leq a \ll |\vec{R}|$ и можно разложиться в ряд Тейлора по степеням r/R . Имеем, что

$$|\vec{R} - \vec{r}| \approx R - (\vec{r}, \vec{n}), \quad \vec{n} = \frac{\vec{R}}{R}$$

и

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|} \approx \frac{1}{R} + \frac{(\vec{r}, \vec{n})}{R^2}.$$

Тогда (349) можно преобразовать в

$$\psi(\vec{R}) \approx A e^{i\vec{k}\vec{R}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i\vec{k}\vec{R}}}{R} \int d^3\vec{r} \left(1 + \frac{(\vec{r}, \vec{n})}{R}\right) e^{i\vec{k}(\vec{n}, \vec{r})} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \equiv$$

$$\equiv A e^{i \vec{k} \vec{R}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{i k R}}{R}, \quad (350)$$

где обычно приближают:

$$f(\theta, \varphi) \equiv f(\vec{n}) \approx -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int d^3 \vec{r} e^{i k(\vec{n}, \vec{r})} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}), \quad (351)$$

где углы θ, φ определяют направление единичного вектора \vec{n} .

Физический смысл этой величины мы подробно обсудим на следующей лекции. Она называется амплитудой рассеяния и, как видно, явно зависит от $V(\vec{r})$. Также в ней стоит точная волновая функция $\psi(\vec{r})$. В первом порядке теории возмущений вместо последнего выражения имеем:

$$f(\theta, \varphi) \approx -\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int d^3 \vec{r} e^{i k(\vec{n}, \vec{r})} V(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r}), \quad (352)$$

где мы заменили точную $\psi(\vec{r})$ на решение свободного уравнения Шредингера $\psi^{(0)}(\vec{r}) = A e^{i \vec{k} \vec{R}}$.

XI. Лекция. *Постановка задачи о рассеянии, пределы применимости борновского приближения, медленные и быстрые частицы, рассеяние в центральном поле в борновском приближении, фазовая теория рассеяния (парциальные волны, амплитуды и сечения рассеяния), сферические волны, рассеяние медленных частиц в рамках фазовой теории, рассеяние тождественных частиц, оптическая теорема.*

1. Прежде чем двигаться дальше, повторим еще раз постановку задачи о рассеянии квантов. Различается упругое и неупругое рассеяние. При упругом рассеянии энергия рассеивающихся частиц не меняется. Иначе рассеяние неупругое. Мы здесь будем обсуждать только упругое рассеяние.

При рассеянии на покоящийся центр падает поток частиц. В результате этого возникают рассеянные кванты. То есть мы имеем суперпозицию падающей и рассеянной волн вероятности:

$$\psi = \psi^{(0)} + \delta\psi. \quad (353)$$

Тогда вероятность рассеянному кванту пройти за единицу времени через площадь dS , ориентированную в соответствующий элемент телесного угла $d\Omega$, равна:

$$dW = |\delta\psi|^2 v dS = |\delta\psi|^2 v R^2 d\Omega,$$

где плотность потока вероятности рассеянной волны определяется как $\left| \frac{\vec{j}}{j} \right| = |\delta\psi|^2 v$, а $v = \hbar k/m$ — это скорость квантов ($k = \sqrt{2mE}/\hbar$).

На прошлой лекции мы представили суперпозицию (353) в виде:

$$\psi_k(\vec{R}) = A e^{i\vec{k}\vec{R}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikR}}{R}, \quad (354)$$

где $R = |\vec{R}|$, $k = |\vec{k}|$, $\psi^{(0)} = A e^{i\vec{k}\vec{R}}$ описывает падающую плоскую волну, а дополнение к ней в $\psi_k(\vec{R})$ — расходящуюся из центра сферическую рассеянную волну:

$$\delta\psi = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikR}}{R}.$$

Тогда

$$dW = v |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega.$$

При этом, число квантов попавших на единичную площадь мишени в единицу времени равно просто плотности потока вероятности:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^{(0)*} \vec{\partial} \psi^{(0)} - \psi^{(0)} \vec{\partial} \psi^{(0)*} \right), \quad \psi^{(0)} \equiv A e^{i\vec{k}\vec{R}}.$$

Если положить $A = 1$, тогда $\vec{j} = \vec{v}$ и в единицу времени падает один квант. В таком случае сечение рассеяния равно:

$$d\sigma = \frac{dW}{|\vec{j}|} = |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega, \quad (355)$$

то есть функция $f(\theta, \varphi)$ имеет смысл амплитуды рассеяния. Задачей теории рассеяния фактически является нахождение этой функции.

Здесь стоит подчеркнуть различие квантового рассеяния от классического. В последнем есть прицельный параметр, а в первом его нет. Это связано с тем, что в квантовом случае мы рассеиваем волну вероятности, которая заполняет все пространство. Очевидно в реальной ситуации объем в пару десятков сантиметров вокруг рассеивающего центра (а то и значительно меньшие масштабы — сколько именно зависит от конкретной ситуации) уже и является всем “бесконечным пространством”.

2. На прошлой лекции мы нашли, что в рамках теории возмущений в так называемом борновском приближении:

$$f(\theta, \varphi) = f(\vec{n}) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r} e^{ik(\vec{n}, \vec{r})} V(\vec{r}) \psi^{(0)}(\vec{r}). \quad (356)$$

Условие применимости теории возмущений в данной задаче очевидно имеет вид:

$$|\delta\psi| \ll |\psi^{(0)}| \quad \rightarrow \quad \left| \frac{f(\theta, \varphi)}{R} \right| \ll 1.$$

Обсудим это условие подробнее, различая отдельно два случая: медленные, $ka \ll 1$, и быстрые, $ka \gg 1$, частицы. Здесь a — это характерный размер, внутри которого рассеивающий потенциал $V(\vec{r})$ существенно отличен от нуля.

Так как интеграл в (356) фактически берется в области $|\vec{r}'| \lesssim a$, то в случае медленных частиц произведением $k r$ в экспоненте под интегралом можно пренебречь. Тогда оценка величины $|\delta\psi|$ дается следующим выражением:

$$|\delta\psi| \sim \frac{m a^2 V_0}{\hbar^2} \ll 1,$$

где V_0 определяет порядок $V(\vec{r})$. То есть должно быть выполнено условие:

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{m a^2}, \quad k a \ll 1, \quad (357)$$

для применимости борновского приближения в случае рассеяния медленных частиц.

Заметим, что $\hbar^2/m a^2$ — это порядок величины кинетической энергии кванта, заключенного в объеме с характерным размером a . То есть (357) является обратным к условию существования дискретных уровней энергии в трехмерной яме глубины V_0 и размера a .

В случае быстрых частиц удобнее оценку производить прямо из уравнения Шредингера. Пусть вектор \vec{k} параллелен оси Oz . Тогда из уравнения Шредингера для (353) следует, что:

$$\Delta \delta\psi + k^2 \delta\psi \approx \frac{2m}{\hbar^2} V \psi^{(0)}, \quad (358)$$

с учетом того, что $\Delta \psi^{(0)} + k^2 \psi^{(0)} = 0$. Из общих соображений ясно, что рассеяние быстрых частиц будет происходить в основном вперед — вдоль направления движения падающих. Ниже мы это явно покажем. Поэтому искать решение уравнения (358) мы будем в виде:

$$\delta\psi(z) = F(z) e^{i k z}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

и считать, что k очень велико, то следующее из (358) уравнение на $F(z)$ приобретает приближенный вид:

$$2 i k \frac{\partial F}{\partial z} \approx \frac{2mV}{\hbar^2}.$$

Откуда

$$\delta\psi \approx -\frac{i m}{\hbar^2 k} e^{i k z} \int dz V.$$

Оценка интеграла в этом выражении дает

$$|\delta\psi| \sim \frac{m V_0 a}{\hbar^2 k},$$

то есть условие применимости теории возмущений для быстрых частиц имеет вид:

$$V_0 \ll \frac{\hbar^2}{m a^2} k a = \frac{\hbar v}{a}, \quad k a \gg 1,$$

где $v = \hbar k/m$ — скорость квантов.

3. Рассмотрим теперь в борновском приближении рассеяние на центральном потенциале $V(\vec{r}) = V(r)$. В этом случае имеется цилиндрическая симметрия вокруг направления падающего пучка квантов. Поэтому $f(\theta, \varphi) = f(\theta)$, то есть зависимость от φ пропадает. Мы здесь считаем, что угол θ отсчитывается от направления полета пучка квантов.

В таком случае из (356) следует, что

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\Omega \int_0^\infty dr r^2 V(r) e^{i[\vec{k}\vec{r} - k(\vec{r}, \vec{n})]},$$

где мы явно подставили $\psi^{(0)}(\vec{r})$. Обозначим $k\vec{n} = \vec{k}'$ — это, очевидно, импульс рассеянного кванта. Тогда $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ — это переданный импульс. Так как для упругого рассеяния $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$, то $|\vec{q}| = 2k \sin(\theta/2)$.

В результате имеем, что

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\vec{r} e^{i\vec{q}\vec{r}} V(r). \quad (359)$$

То есть фактически амплитуда рассеяния $f(\theta)$ является фурье образом от потенциала $V(r)$. А зависимость от θ определяется лишь через переданный импульс \vec{q} . В результате мы получаем, что

$$d\sigma = \frac{m}{(2\pi\hbar^2)^2} |V[q(\theta)]|^2 d\Omega,$$

где $V[q(\theta)] \equiv f(\theta)$ — Фурье образ от $V(r)$.

Интеграл в (359) можно упростить до:

$$\int_0^\infty dr r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^1 d \cos \vartheta V(r) e^{i q r \cos \vartheta} =$$

$$= 4 \pi \int_0^\infty dr r V(r) \frac{\sin(qr)}{q}.$$

Откуда следует окончательная формула для амплитуды рассеяния в рассматриваемой ситуации:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \frac{\sin[q(\theta)r]}{q(\theta)}, \quad q(\theta) = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right). \quad (360)$$

Для сходимости интеграла в этом выражении необходимо, чтобы потенциал имел следующее поведение на бесконечности:

$$V(r) \Big|_{r \rightarrow \infty} \sim \frac{1}{r^n}, \quad n \geq 3.$$

Как объяснялось выше, для медленных квантов, $ka \ll 1$, под интегралом в (359) и (360) можно положить $e^{i\vec{k}\vec{r}} \rightarrow 1$. Тогда из (360) видно, что $f(\theta) \approx \text{const}$. То есть медленные частицы рассеиваются изотропически — равновероятно во всех направлениях.

Для быстрых частиц, $ka \gg 1$, наоборот, нужно учитывать только такие значения q , что $qa \lesssim 1$, то есть $ka \sin(\theta/2) \lesssim 1$ или $\sin(\theta/2) \lesssim 1/ka \ll 1$. Иначе подынтегральное выражение в (359) и (360) сильно осциллирует и соответствующий вклад в интеграл пренебрежимо мал. Таким образом, рассеяние быстрых частиц является сильно анизотропным и идет в основном вперед в малый угол порядка $\theta \lesssim 1/ka$.

4. Перейдем к обсуждению так называемого метода парциальных мод (волн или гармоник) или к фазовой теории рассеяния. При рассеянии на центральном потенциале полную волновую функцию (353) удобно искать в виде разложения по сферическим модам:

$$\psi(R, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{|m| \leq l} B_{lm} \mathcal{R}_l(R) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (361)$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — это сферические гармоники, а B_{lm} некоторые константы. Как мы знаем еще с прошлого семестра, тогда из уравнения Шредингера следует соотношение на $\mathcal{R}_l(R)$:

$$\frac{d^2}{dR^2} (R \mathcal{R}_l) + \left[k^2 - \frac{2mV(R)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] (R \mathcal{R}_l) = 0, \quad (362)$$

где $k^2 = 2mE/\hbar^2$. Для сходимости нормировочного интеграла от $|\psi(R, \theta, \varphi)|^2$ необходимо, чтобы $R\mathcal{R}_l \rightarrow 0$ при $R \rightarrow 0$. Это условие определяет единственное решение уравнения второй степени (362).

На больших расстояниях от рассеивающего центра, $R \rightarrow \infty$ в характерных единицах, уравнение (362) принимает вид:

$$\frac{d^2}{dR^2}\chi_l + k^2\chi_l \approx 0, \quad \chi_l \equiv R\mathcal{R}_l. \quad (363)$$

Общее решение такого уравнения можно записать как:

$$\chi_l(R) \approx A_l \sin\left(kR - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right), \quad R \rightarrow \infty. \quad (364)$$

Здесь фаза $\pi l/2$ введена для удобства, как станет ясно из дальнейшего обсуждения, а δ_l зависит от свойств потенциала. Заметим, что $V(R)$ отсутствует в уравнении (363), но не забывайте, что мы здесь обсуждаем асимптотику решения уравнения (362). Полный набор δ_l для всех значений l несет всю необходимую информацию про потенциал $V(R)$ для задачи рассеяния.

Чтобы представить всю суперпозицию (354) в виде (361), надо разложить падающую волну $\psi^{(0)}(R) = e^{ikZ} = e^{ikR\cos\theta}$ по сферическим модам. Так как эта функция зависит только от θ , то в разложении участвуют только сферические моды с магнитным числом $m = 0$, то есть:

$$e^{ikR\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} F_l(R) Y_{l0}(\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} F_l(R) \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta), \quad (365)$$

где $P_l(\cos\theta)$ — это полиномы Лежандра. Фактически мы здесь имеем разложение функции от $\cos\theta$ по полному базису, который и состоит из обсуждаемых полиномов, как мы знаем с прошлого семестра.

Из условия ортогональности полиномов Лежандра, для определения коэффициентов разложения $F_l(R)$ получаем выражение вида:

$$F_l(R) = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{ikR\cos\theta} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta).$$

Обозначая $\xi = \cos\theta$, получаем, что

$$F_l(R) = \sqrt{\pi(2l+1)} \int_{-1}^1 d\xi e^{ikR\xi} P_l(\xi). \quad (366)$$

Возникающий здесь интеграл является табличным и выражается через так называемые функции Бесселя $J_{l+1/2}(kR)$. (Мы это обсудим ниже.) Но для нашей задачи достаточно знать лишь его асимптотическое поведение при $R \rightarrow \infty$.

Поэтому мы поступим следующим образом. Возьмем интеграл в (366) по частям:

$$\begin{aligned} F_l(R) &= \sqrt{\pi(2l+1)} \int_{-1}^1 P_l(\xi) d\left(\frac{e^{ikR\xi}}{ikR}\right) = \\ &= \sqrt{\pi(2l+1)} \left[P_l(\xi) \frac{e^{ikR\xi}}{ikR} \Big|_{-1}^1 - \frac{1}{ikR} \int_{-1}^1 d\xi P_l'(\xi) e^{ikR\xi} \right]. \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что второе слагаемое здесь имеет порядок $(kR)^{-2}$. В этом можно убедиться, проинтегрировав его опять по частям. Поэтому мы получаем:

$$F_l(R) \approx \frac{\sqrt{\pi(2l+1)}}{ikR} \left[e^{ikR} - (-1)^l e^{-ikR} \right], \quad R \rightarrow \infty.$$

Здесь мы учли, что $P_l(1) = 1$ и $P_l(-1) = (-1)^l$. Таким образом, падающая волна на больших расстояниях от рассеивающего центра имеет следующий асимптотический вид:

$$e^{ikR \cos \theta} \approx \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ikR} \left[e^{ikR} - (-1)^l e^{-ikR} \right] P_l(\cos \theta), \quad R \rightarrow \infty. \quad (367)$$

В подобном же виде можно записать и асимптотику любой функции вида (361), используя $\chi_l(R)$ из (364):

$$\begin{aligned} \psi(R, \theta, \varphi) &\approx \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{|m| \leq l} \frac{B_{lm} A_l}{2iR} \times \\ &\times \left[e^{i(kR - \frac{\pi}{2} + \delta_l)} - e^{-i(kR - \frac{\pi}{2} + \delta_l)} \right] Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad R \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (368)$$

Вынесем теперь за квадратные скобки под суммой множитель $e^{i(-\frac{\pi l}{2}-\delta_l)}$ и введем обозначение $C_{lm} \equiv A_l B_{lm} e^{i(-\frac{\pi l}{2}-\delta_l)}$. Далее воспользуемся тем, что $e^{i\pi l} = (-1)^l$. Тогда (368) примет вид:

$$\psi(R, \theta, \varphi) \approx \sum_{l,m} \frac{C_{lm}}{2ikR} \left[e^{i(kR+2\delta_l)} - (-1)^l e^{-ikR} \right] Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (369)$$

Вычтем из этого выражение плоскую волну представленную в виде (367). Чтобы ответ для разности (369) и (367) имел вид пропорциональный расходящейся из центра волны:

$$\psi(R, \theta, \varphi) - e^{ikR \cos \theta} \sim \frac{e^{ikR}}{R}, \quad R \rightarrow \infty,$$

необходимо сократить в разности все сходящиеся к центру волны. Для этого необходимо, чтобы C_{lm} имели следующий вид:

$$C_{lm} = 2 \frac{\sqrt{\pi(2l+1)}}{k} \delta_{m0}.$$

Тогда

$$\psi(R, \theta, \varphi) - e^{ikR \cos \theta} \approx \frac{e^{ikR}}{R} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta).$$

Из этой формулы мы получаем следующее выражение для амплитуды рассеяния на центрально симметричном потенциале:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta) \equiv \\ &\equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta), \end{aligned} \quad (370)$$

где мы ввели обозначение

$$f_l \equiv \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{1}{g_l - ik}, \quad g_l = k \operatorname{ctg} \delta_l. \quad (371)$$

Это так называемые парциальные амплитуды.

Как мы сейчас увидим, для решения задачи рассеяния необходимо найти фазы δ_l . Для этого надо найти асимптотику в пределе $R \rightarrow \infty$ такого решения уравнения Шредингера (362), которое при $R \rightarrow 0$ имеет регулярное поведение $R \mathcal{R}_l \rightarrow 0$. Эта задача может быть решена явно только для конкретных примеров $V(R)$.

Для полного же сечения из (355) и (370) получаем:

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin \theta d\theta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (372)$$

где мы использовали условие нормировки для полиномов Лежандра.

Каждый из членов суммы на правой стороне соотношения (372) представляет собой парциальное сечение:

$$\sigma_l = 4\pi (2l+1) |f_l|^2$$

для рассеяния квантов с данным значением l . Отметим на будущее, что максимально возможное значение этого сечения равно

$$\sigma_l^{(max)} = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1), \quad (373)$$

как следует из (371).

5. Обсудим теперь общие свойства рассеяния медленных частиц, так как в таком случае возникает универсальное поведение, когда характерные свойства амплитуды рассеяния f не сильно зависят от конкретного вида потенциала V . Для этого введем так называемые сферические волны. Дело в том, что радиальное уравнение Шредингера (362) на больших расстояниях от рассеивающего центра, $R \gg a$, там где $V(R) \rightarrow 0$, можно записать в виде:

$$\hat{H}_l \mathcal{R}_l = \frac{\hbar^2}{2m} \mathcal{R}_l, \quad \hat{H}_l \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} x^2 \frac{d}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right], \quad x \equiv kR \quad (374)$$

Так же как в случае осциллятора это уравнение можно переписать в удобной форме. А именно, в случае $l = 0$ введем

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{x} \frac{d}{dx} x = -i\hbar \left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{x} \right), \quad \hat{H}_{l=0} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m}. \quad (375)$$

Собственные функции оператора \hat{p}_r — это сходящиеся и расходящиеся сферические волны $e^{\pm i k R}/k R$. Поэтому при $l = 0$ решение задачи (374) — это произвольная линейная комбинация таких сферических волн или же функций вида:

$$j_0(kr) = \frac{\sin(kR)}{kR}, \quad n_0(kR) = -\frac{\cos(kR)}{kR}.$$

В случае $l > 0$ гамильтониан \hat{H}_l можно представить как:

$$\begin{aligned} \hat{H}_l &= \frac{1}{2m} \hat{a}_l^+ \hat{a}_l, \\ \hat{a}_l &= \hat{p}_r - \frac{i \hbar l}{x}, \quad \hat{a}_l^+ = \hat{p}_r + \frac{i \hbar l}{x}. \end{aligned} \quad (376)$$

При этом имеем следующие коммутационные соотношения рассматриваемых операторов:

$$[\hat{a}_l, \hat{a}_l^+] = -\frac{2 \hbar^2 l}{x^2}.$$

Откуда, в частности, следует, что

$$\hat{H}_l \hat{a}_l^+ = \hat{a}_l^+ \hat{H}_{l-1}.$$

Таким образом, если $\mathcal{R}_{l-1}(x)$ — это собственная функция \hat{H}_{l-1} , то $\hat{a}_l^+ \mathcal{R}_{l-1}(x)$ — это собственная функция \hat{H}_l с точностью до нормировочного множителя. Другими словами

$$\hat{a}_l^+ \equiv -i \hbar x^{l-1} \frac{d}{dx} \frac{1}{x^{l-1}}$$

— это оператор повышающий l на единицу. Следовательно, мы имеем, что

$$\mathcal{R}_l \sim \hat{a}_l^+ \mathcal{R}_{l-1} \sim \dots \hat{a}_l^+ \hat{a}_{l-1}^+ \dots \hat{a}_1^+ \mathcal{R}_0 \sim x^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \mathcal{R}_0.$$

В соответствии с этим определим вещественные решения уравнения (374) как:

$$j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}, \quad n_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}. \quad (377)$$

Можно показать, что эти гармоники выражаются через функции Бесселя:

$$j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x), \quad n_l(x) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-l-\frac{1}{2}}(x),$$

как было рассказано выше. Но нам эти соотношения не нужны. Мы лишь здесь указываем связь обсуждения в данной секции с предыдущими разделами этой лекции.

Чтобы получить лидирующие асимптотики этих функций при $x \rightarrow \infty$, которые нужны нам для задачи рассеяния, необходимо применять производную в (377) только к тригонометрическим функциям. Иначе будет повышаться отрицательная степень x , что приведет к выражениям подавленным при $x \rightarrow \infty$.

Каждое дифференцирование тригонометрической функции, можно представить как сдвиг ее аргумента на $\pi/2$. Поэтому:

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right), \quad n_l(x) \approx -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{\pi l}{2}\right), \quad x \rightarrow \infty. \quad (378)$$

При нахождении же асимптотик на малых значениях x , грубо говоря, надо дифференцировать только знаменатель в (377). Поэтому:

$$j_l(x) \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(x) \approx -\frac{(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad x \rightarrow 0. \quad (379)$$

Функция $n_l(x)$ сингулярна при $x \rightarrow 0$. Однако она может возникать в асимптотиках $x \rightarrow \infty$ решения уравнения Шредингера (362) с потенциалом V .

6. Теперь мы готовы к обсуждению рассеяния медленных квантов, $ka \ll 1$. Будем считать, что на больших расстояниях потенциал падает быстрее, чем $1/R^2$. Тогда на расстояниях намного больше характерного радиуса действия потенциала, $R \gg a$, уравнение Шредингера сводится к (374). Это означает, что в области $a \ll R \ll 1/k$ решение уравнения Шредингера мы можем записать как

$$\mathcal{R}_l(R) \approx 2k \left[j_l(kR) \cos \delta_l - n_l(kR) \sin \delta_l \right]. \quad (380)$$

Именно такая комбинация j_l и n_l имеет такую асимптотику как (364):

$$\mathcal{R}_l(R) \approx \frac{2}{R} \sin \left(kR - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right), \quad R \rightarrow \infty. \quad (381)$$

С другой стороны, в области $a \ll R \ll 1/k$, рассматриваемое решение ведет себя и как

$$\mathcal{R}_l(R) \approx C_1 R^l + \frac{C_2}{R^{l+1}}, \quad R \rightarrow 0, \quad (382)$$

с коэффициентами:

$$C_1 \approx \frac{2 k^{l+1} \cos \delta_l}{(2l+1)!!}, \quad C_2 \approx \frac{2 (2l-1)!! \sin \delta_l}{k^l},$$

которые следуют из (379). Таким образом:

$$\operatorname{tg} \delta_l \approx \frac{C_2/C_1}{(2l-1)!! (2l+1)!!} k^{2l+1}.$$

Зависимость констант $C_{1,2}$ от l определяется конкретным видом потенциала. Однако отношение C_2/C_1 не зависит от нормировки и k , так как в пределе $R \rightarrow 0$ уравнение (374) становится однородным, то есть перестает зависеть от k . Таким образом, мы получаем основной закон зависимости фаз от импульса:

$$\delta_l \sim (ka)^{2l+1}, \quad ka \ll 1,$$

где характерный параметр потенциала a возникает из отношения C_2/C_1 — единственной величины определяющей конкретным видом потенциала. Мы восстановили параметр a в последней формуле из размерностных соображений.

В результате основной вклад в сечение рассеяния медленных частиц, $ka \ll 1$, дает δ_0 — наибольшая из фаз в рассматриваемом пределе. То есть мы имеем так называемое рассеяние в s -волне или s -рассеяние:

$$f(\theta) \approx \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik} \approx \frac{\delta_0}{k} = \frac{C_2}{C_1} \equiv -\alpha,$$

где α — так называемая длина рассеяния Ферми. Получающееся при этом сечение рассеяния является изотропным:

$$\sigma = 4\pi\alpha^2,$$

что согласуется с выводами, сделанными при обсуждении борновского приближения. Однако здесь имеются нюансы и характерные исключения, которые мы обсудим при решении задач.

7. При рассеянии тождественных частиц вместо (354) необходимо рассматривать волновую функцию с соответствующими свойствами симметрии относительно перестановки квантов:

$$\psi^{(S)}(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi(\vec{R}) + (-1)^S \psi(-\vec{R}) \right], \quad (383)$$

где S — это полный спин двух рассеивающихся частиц. В первом слагаемом в рассматриваемой волновой функции все тривиально, а во втором следует воспользоваться изменением углов сферической системы координат при инверсии:

$$\vec{R} \rightarrow -\vec{R} \Leftrightarrow \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \pi + \varphi.$$

Следовательно,

$$\psi^{(S)}(\vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} + (-1)^S e^{-i\vec{k}\vec{R}} + \left[f(\theta) + (-1)^S f(\pi - \theta) \right] \frac{e^{ikR}}{R},$$

где мы опустили множитель $1/\sqrt{2}$, так как в данной задаче мы нормируем поток вероятности, а не саму волновую функцию. В такой ситуации:

$$\frac{d\sigma^{(S)}}{d\Omega} = |f(\theta) + (-1)^S f(\pi - \theta)|^2.$$

Это выражение и описывает сечение рассеяния тождественных частиц.

8. Амплитуда рассеяния в произвольном (не обязательно центральном) поле удовлетворяет фундаментальному соотношению, являющемуся следствием некоторых общих физических требований. Начнем с того, что еще раз напомним, что при упругом рассеянии в произвольном потенциале волновая функция на больших расстояниях имеет следующий асимптотический вид:

$$\psi(R, \vec{n}, \vec{n}') \approx e^{ikR(\vec{n}, \vec{n}')} + f(\vec{n}, \vec{n}') \frac{e^{ikR}}{R}, \quad (384)$$

где $\vec{n} = \vec{k}/k$ — единичный вектор вдоль направления распространения падающей плоской волны, а $\vec{n}' = \vec{R}/R$ — единичный вектор вдоль

направления наблюдения рассеянной волны, то есть $\vec{n}' = \vec{k}'/k$, $k = k'$. Для потенциала общего вида амплитуда рассеяния f зависит от \vec{n} и \vec{n}' по отдельности. И только в центральном поле f зависит от угла между этими векторами, то есть от скалярного произведения (\vec{n}, \vec{n}') .

Любая суперпозиция вида (384) с разными направлениями \vec{n} представляет некоторый возможный процесс рассеяния. Рассмотрим линейную комбинацию таких векторов состояний как (384) с различными \vec{n} . А именно, умножим (384) на некоторую произвольную функцию $F(\vec{n})$ и проинтегрируем по всем направлениям \vec{n} . Получим:

$$\tilde{\psi}(R, \vec{n}') \approx \int d\Omega F(\vec{n}) e^{ikR(\vec{n}, \vec{n}')} + \frac{e^{ikR}}{R} \int d\Omega F(\vec{n}) f(\vec{n}, \vec{n}'), \quad (385)$$

где $d\Omega \equiv d^2\vec{n}$ — элемент телесного угла.

Поскольку при изучении рассеяния нас интересует поведение $\tilde{\psi}_k(R, \vec{n}')$ при $R \rightarrow \infty$, то множитель $e^{ikR(\vec{n}, \vec{n}')}$ в первом интеграле в (385) очень быстро осциллирует при изменении направления \vec{n} . Поэтому лидирующий вклад в этот интеграл в пределе $R \rightarrow \infty$ дают $\vec{n} \approx \pm \vec{n}'$. Именно при таких значениях \vec{n} показатель экспоненты под интегралом достигает экстремума.

Действительно, для оценки первого интеграла в (385) можно продеформировать контур интегрирования в комплексной плоскости $\alpha = \cos \vartheta$ (ϑ — угол между \vec{n} и \vec{n}') с отрезка $\alpha \in [-1, 1]$ на действительной оси вглубь верхней полуплоскости, так, чтобы его концы оставались закрепленными в $\alpha = \pm 1$. Тогда при удалении от каждого из этих концов функция $e^{ikR\alpha}$ быстро затухает, так как $R \rightarrow \infty$. В результате:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(R, \vec{n}') \Big|_{R \rightarrow \infty} \approx & 2\pi i F(-\vec{n}') \frac{e^{-ikR}}{kR} - 2\pi i F(\vec{n}') \frac{e^{ikR}}{kR} + \\ & + \frac{e^{ikR}}{R} \int d\Omega F(\vec{n}) f(\vec{n}, \vec{n}'). \end{aligned} \quad (386)$$

Запишем последнее выражение в виде:

$$\tilde{\psi}(R, \vec{n}') \Big|_{R \rightarrow \infty} \approx \frac{2\pi i}{k} \left[F(-\vec{n}') \frac{e^{-ikR}}{R} - \frac{e^{ikR}}{R} \hat{S} F(\vec{n}') \right], \quad (387)$$

где мы ввели так называемый оператор S -матрицы, который имеет следующий вид:

$$\hat{S} = \hat{\mathbf{1}} + 2ik\hat{f}, \quad \hat{f}F(\vec{n}') \equiv \frac{1}{4\pi} \int d^2\vec{n} F(\vec{n}) f(\vec{n}, \vec{n}'). \quad (388)$$

При этом первый вклад на правой стороне (387) представляет собой сходящуюся к центру волну, а второй — расходящуюся. Сохранение числа частиц при упругом рассеянии выражается равенством полных потоков частиц в сходящейся и расходящейся волнах. Иными словами сходящаяся и расходящаяся сферические волны в (387) должны иметь одинаковую нормировку. Это значит, что S -матрица должна быть унитарным оператором:

$$\hat{S}\hat{S}^+ = \hat{\mathbf{1}}.$$

Подставив сюда выражение (388), получим условие вида:

$$\hat{f} - \hat{f}^+ = 2ik\hat{f}\hat{f}^+. \quad (389)$$

Если же учесть явный вид оператора \hat{f} в (388), то последнее соотношение можно явно записать в виде:

$$f(\vec{n}, \vec{n}') - f^*(\vec{n}', \vec{n}) = \frac{ik}{2\pi} \int d^2\vec{n}'' f(\vec{n}, \vec{n}'') f^*(\vec{n}'', \vec{n}'). \quad (390)$$

Из полученного условия следует так называемая оптическая теорема. А именно, при $\vec{n} = \vec{n}'$ интеграл на правой стороне (390) есть ни что иное как полное сечение рассеяния:

$$\sigma = \int d\Omega'' \left| f(\vec{n}, \vec{n}'') \right|^2.$$

Разность же на левой стороне (390) сводится к мнимой части амплитуды рассеяния на нулевой угол $f(\vec{n}, \vec{n})$. В результате мы получаем:

$$\text{Im}f(\vec{n}, \vec{n}) = \frac{k}{4\pi} \sigma \quad (391)$$

— соотношение оптической теоремы, которое связывает мнимую часть амплитуды рассеяния на нулевой угол с полным сечением.

Напомним, что до сих пор мы рассматривали нестационарную задачу упругого рассеяния, решая стационарное уравнение Шредингера. Рассмотрение процесса рассеяния в рамках нестационарной задачи

дает более наглядный взгляд на соотношение унитарности S -матрицы и на оптическую теорему.

В нестационарном случае задача ставится следующим образом. При $t_0 \rightarrow -\infty$ (в характерных единицах) выбирается начальное состояние $|\psi^{(0)}\rangle$ (собственное состояние невозмущенного гамильтониана), описывающее падающую волну. Тогда решение нестационарного уравнения Шредингера при $t \rightarrow +\infty$ (в характерных единицах), то есть когда рассеянный квант ушел далеко от рассеивающего центра, имеет вид:

$$|\Psi\rangle = \hat{U}_I(+\infty, -\infty) |\psi^{(0)}\rangle, \quad (392)$$

где, как мы знаем:

$$\hat{U}_I(+\infty, -\infty) \equiv T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \hat{V}_I(t)},$$

а \hat{V}_I — рассеивающий потенциал в представлении взаимодействия. Оператор эволюции в представлении взаимодействия можно записать как:

$$\hat{U} = \hat{\mathbf{1}} - i\hat{T},$$

где оператор \hat{T} зависит от \hat{V}_I , так как содержит ряд по степеням возмущения, и описывает процесс рассеяния. Таким образом, имеем, что

$$|\Psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle - i\hat{T} |\psi^{(0)}\rangle, \quad (393)$$

что просто является соотношением аналогичным (384) или (354), но для нестационарной задачи. (Получите самостоятельно связь между этими двумя задачами.) Из условия унитарности оператора эволюции $\hat{U}_I \hat{U}_I^\dagger = \hat{\mathbf{1}}$ следует, что

$$\hat{T} - \hat{T}^\dagger = i\hat{T}\hat{T}^\dagger,$$

что является аналогом соотношения (389) в нестационарной задаче.

ХII. Лекция. Вторичное квантование в модельной ситуации, квантование электромагнитного поля, взаимодействие атомов с квантовым электромагнитным полем, излучение фотонов атомами, правила отбора.

1. На одной из прошлых лекций мы обсудили взаимодействие атомов с классическими электромагнитными полями. Теперь мы перейдем к обсуждению взаимодействия с квантовыми полями. Для этого нам необходимо научиться квантовать поля, то есть разобрать, что такое вторичное квантование. До сих пор мы квантовали только частицы.

В курсе теории поля мы обсудили как получить простейшую теорию поля в непрерывном пределе из механической цепочки шариков. Рассмотрим снова этот пример и проквантуем его. А именно, пусть у нас имеется замкнутая в окружность цепочка из N шариков массы m , соединенных пружинками с коэффициентами Гука κ (см. рис. 24). Шарики могут колебаться вдоль окружности.

Пусть ϕ_j , $j = \overline{1, N}$ — это отклонения шариков из их положений равновесия. Пусть в положении равновесия все пружины не напряжены и шарики находятся на равных расстояниях друг от друга. Уравнения движения шариков в такой цепочке имеют вид:

$$m \ddot{\phi}_j = \kappa [\phi_{j+1} - \phi_j] - \kappa [\phi_j - \phi_{j-1}], \quad j = \overline{1, N}, \quad (394)$$

и $\phi_{N+1} = \phi_1$, так как мы имеем дело с цепочкой на окружности.

Как мы знаем из курса теории поля, в непрерывном пределе²⁰, когда число шариков стремится к бесконечности, $N \rightarrow \infty$, а расстояния между ними стремятся к нулю, $\Delta x \rightarrow 0$, но при этом полный объем системы неограниченно растет, $N \Delta x \rightarrow \infty$, то есть когда окружность разворачивается в прямую, соотношение (394) переходит в волновое уравнение:

$$\frac{1}{\bar{c}^2} \ddot{\phi}(t, x) - \phi''(t, x) = 0, \quad x \in R, \quad (395)$$

где $\dot{\phi} = \partial_t \phi$, $\phi' = \partial_x \phi$ и $1/\bar{c}^2 = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{m}{\kappa \Delta x^2}$ определяет скорость звука в рассматриваемом одномерном кристалле.

²⁰Напомним, что в этом пределе $\phi_j(t) \rightarrow \phi(t, x)$, а также $\phi_{j\pm 1}(t) \rightarrow \phi(t, x \pm \Delta x)$ и $\phi_{j+1}(t) - \phi_j(t) \rightarrow \phi'(t, x) \Delta x$.

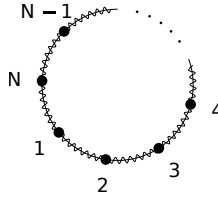


Рис. 24:

Классическая энергия для системы (394) имеет вид:

$$E = \sum_{j=1}^N \left[\frac{m \dot{\phi}_j^2}{2} + \frac{\kappa (\phi_{j+1} - \phi_j)^2}{2} \right]. \quad (396)$$

При квантовании ϕ_j становятся операторами обобщенных координат. Также операторами становятся и импульсы сопряженные этим координатам

$$\hat{p}_j = -i \hbar \partial / \partial \phi_j, \quad [\hat{\phi}_j, \hat{p}_k] = i \hbar \delta_{jk},$$

и мы получаем уравнение Шредингера вида:

$$\begin{aligned} i \hbar \partial_t \Psi[\{\phi_j\}, t] &= \hat{H} \Psi[\{\phi_j\}, t], \\ \hat{H} &= \sum_{j=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \phi_j^2} + \frac{\kappa (\phi_{j+1} - \phi_j)^2}{2} \right]. \end{aligned} \quad (397)$$

Здесь волновая функция $\Psi[\{\phi_j\}, t]$ зависит от полного набора обобщенных координат ϕ_j , $j = \overline{1, N}$.

Далее, классическая энергия для континуальной системы (395), которая получается в непрерывном пределе и в пределе бесконечного объема из (396), имеет следующий вид:

$$E = \frac{\bar{\kappa}}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\frac{1}{c^2} (\dot{\phi})^2 + (\phi')^2 \right], \quad \bar{\kappa} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \kappa \Delta x. \quad (398)$$

Обычно константу $\bar{\kappa}$ убирают перескалируя поле $\phi \rightarrow \sqrt{\bar{\kappa}} \phi$.

Соответственно при квантовании в непрерывном пределе поле $\phi(x)$ становится оператором. Также оператором становится и импульс сопряженный этому полю

$$\pi = \dot{\phi} \rightarrow -i\hbar \frac{\delta}{\delta\phi(x)}, \quad [\hat{\phi}(x), \hat{\pi}(y)] = i\hbar \delta(x-y).$$

Поэтому из (397) мы получаем функциональное уравнение Шредингера на так называемый волновой функционал $\Psi[\phi(\cdot), t]$:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \Psi[\phi(\cdot), t] &= \hat{H} \Psi[\phi(\cdot), t], \\ \hat{H} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\delta^2}{\delta\phi^2(x)} + [\phi'(x)]^2 \right). \end{aligned} \quad (399)$$

Гамильтониан теперь содержит вариационную производную $\delta/\delta\phi(x)$ вместо обычных $\partial/\partial\phi_j$, $j = \overline{1, N}$. С такой производной мы встречались при вычислении вариаций действия:

$$\delta S \equiv \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{\delta S}{\delta z(t)} \delta z(t).$$

В отличие от дифференциального уравнения (397), вариационное (399) плохо определено. В основном это связано с тем, что плохо определена вариационная производная второй степени в двух совпадающих точках:

$$\frac{\delta^2}{\delta\phi^2(x)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta^2}{\delta\phi(x-\epsilon) \delta\phi(x+\epsilon)}.$$

Дело в том, что вариационные производные от функционалов в совпадающих точках имеют бесконечности, с которыми нужно еще разбираться и доопределять. Попробуем однако понять смысл решения уравнения (399) как непрерывный предел решения (397), используя несколько иной подход.

2. Из курса классической механики мы знаем, что систему вроде (394) можно привести к собственным (независимым) колебаниям путем канонического преобразования. Конкретно в случае (394) такое преобразование имеет вид:

$$\phi_j(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \tilde{\phi}_n(t) e^{\frac{ijn}{N}}. \quad (400)$$

Если подставить это разложение в (394), то на $\tilde{\phi}_n$ мы получим уравнение вида:

$$\ddot{\tilde{\phi}}_n + \frac{4\kappa}{m} \sin^2\left(\frac{n}{2N}\right) \tilde{\phi}_n = 0, \quad n = \overline{1, N}, \quad (401)$$

которое описывает N независимых осцилляторов.

Преобразование (400) является дискретным аналогом отображения Фурье:

$$\phi(t, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\phi}_k(t) e^{ikx}. \quad (402)$$

Последнее при подстановке в (395) приводит к осцилляторному уравнению на $\tilde{\phi}_k(t)$:

$$\ddot{\tilde{\phi}}_k + k^2 \bar{c}^2 \tilde{\phi}_k = 0. \quad (403)$$

Заметим, что в непрерывном пределе и в пределе бесконечного объема, в уравнении (401) частоты для длинных волн ($n \ll N$) можно приблизить как:

$$\begin{aligned} \omega_n^2 &\equiv \frac{4\kappa}{m} \sin^2\left(\frac{n}{2N}\right) \approx \frac{4\kappa}{m} \left(\frac{n}{2N}\right)^2 = \\ &= \frac{\kappa \Delta x^2}{m} \left(\frac{n}{N \Delta x}\right)^2 = \bar{c}^2 k^2 \equiv \omega_k^2, \end{aligned} \quad (404)$$

где $\Delta x \rightarrow 0$ — это расстояние между шариками, а $\bar{c}^2 = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\kappa \Delta x^2}{m}$ — скорость звука в одномерном кристалле.

Итак, как мы уже знаем из курса теории поля, преобразование Фурье позволяет перейти к собственным колебаниям поля (403). Таким образом, поля представляется бесконечным набором независимых осцилляторов. То есть (401) и (403) описывают независимые классические осцилляторы, которые пронумерованы индексами n или “ k ”, соответственно. Частоты осцилляторов определяются из уравнения (404).

Однако основная проблема с осцилляторами (401) и (403) заключается в том, что $\tilde{\phi}_n$ и $\tilde{\phi}_k$ являются комплексными величинами. Действительно, из условия $\phi_j^*(t) = \phi_j(t)$ следует, что $\tilde{\phi}_n^* = \tilde{\phi}_{-n}$, а из $\phi^*(t, x) = \phi(t, x)$, что $\tilde{\phi}_k^*(t) = \tilde{\phi}_{-k}(t)$. Это в частности значит, что не смотря на то, что ϕ_j и $\phi(x)$ являются эрмитовыми операторами, $\tilde{\phi}_n$ и

$\tilde{\phi}_k$ таковыми быть не могут. Напомним, что в обычно линейном квантовом осцилляторе оператор \hat{x} эрмитов.

3. Чтобы понять как обойти эту проблему, рассмотрим один обычный осциллятор с частотой $\omega_n = \sqrt{\frac{4k}{m}} \left| \sin\left(\frac{n}{2N}\right) \right|$ и положим массу у осциллятора равной единице (не путать ее с массой шариков m). Тогда:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_n^2}{2} + \frac{\omega_n^2 x_n^2}{2}, \quad \hat{p}_n = -i\hbar \frac{d}{dx_n}. \quad (405)$$

Связь x_n с ϕ_j или $\tilde{\phi}_n$ мы пока не обсуждаем.

Введем операторы повышения и понижения \hat{a}_n^+ и \hat{a}_n так же, как в обычном осцилляторе:

$$\hat{x}_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_n}} (\hat{a}_n + \hat{a}_n^+), \quad \hat{p}_n = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_n}{2}} (\hat{a}_n - \hat{a}_n^+). \quad (406)$$

Теперь, из решения уравнений Гейзенберга:

$$\frac{d}{dt}\hat{a}_n = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}_n], \quad \frac{d}{dt}\hat{a}_n^+ = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}_n^+]$$

где $\hat{H} = \hbar\omega_n (\hat{a}_n^+ \hat{a}_n + \frac{1}{2})$, мы находим, что

$$\begin{aligned} \hat{x}_n(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_n}} (\hat{a}_n e^{-i\omega_n t} + \hat{a}_n^+ e^{i\omega_n t}), \\ \hat{p}_n(t) &= -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_n}{2}} (\hat{a}_n e^{-i\omega_n t} - \hat{a}_n^+ e^{i\omega_n t}). \end{aligned} \quad (407)$$

Заметим, что $\hat{p}_n = \dot{\hat{x}}_n$, как и должно быть когда масса частицы равна единице.

Уравнения (407) наводят на мысль, что при квантовании, вместо соотношения (400) для оператора $\hat{\phi}_j(t)$ следует использовать разложение вида:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_j(t) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2\omega_n}} (\hat{a}_n e^{-i\omega_n t} + \hat{a}_{-n}^+ e^{i\omega_n t}) e^{\frac{ij n}{N}} = \\ &= \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{\hbar c^2}{2N\omega_n}} (\hat{a}_n e^{-i\omega_n t + \frac{ij n}{N}} + \hat{a}_n^+ e^{i\omega_n t - \frac{ij n}{N}}), \end{aligned} \quad (408)$$

где на последнем шаге мы преобразовали $n \rightarrow -n$ во втором члене под знаком суммы. При этом, оператор $\hat{\phi}_n(t)$, который решает уравнение (401), фактически представлен в виде:

$$\hat{\phi}_n(t) = \sqrt{\frac{\hbar \bar{c}^2}{2\omega_n}} \left(\hat{a}_n e^{-i\omega_n t} + \hat{a}_{-n}^+ e^{i\omega_n t} \right) = \hat{\phi}_{-n}^*(t),$$

$$\omega_n^2 = \frac{4\kappa}{m} \sin^2 \left(\frac{n}{2N} \right).$$

Тогда, если операторы рождения и уничтожения \hat{a}_n^+ и \hat{a}_n удовлетворяют коммутационным соотношениям для N отдельных осцилляторов:

$$\left[\hat{a}_n, \hat{a}_{n'}^+ \right] = \delta_{nn'}, \quad \left[\hat{a}_n, \hat{a}_{n'} \right] = \left[\hat{a}_n^+, \hat{a}_{n'}^+ \right] = 0, \quad (409)$$

то обобщенные координаты (408) и отвечающие им импульсы

$$\hat{\pi}_j(t) \equiv \dot{\phi}_j(t) = -i \sum_{n=1}^N \sqrt{\frac{\omega_n}{2N\hbar\bar{c}^2}} \left(\hat{a}_n e^{-i\omega_n t + \frac{ij n}{N}} - \hat{a}_n^+ e^{i\omega_n t - \frac{ij n}{N}} \right),$$

удовлетворяют каноническим коммутационным соотношениям:

$$\left[\hat{\pi}_j(t), \hat{\phi}_{j'}(t) \right] = -i\hbar \delta_{jj'}.$$

Для доказательства последнего уравнения необходимо использовать, что

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{\frac{i(j-j')n}{N}} = \delta_{jj'}. \quad (410)$$

Помимо этого, если подставить оператор (408) в гамильтониан (397), где $\hat{\pi}_j \equiv -i\hbar \partial/\partial\phi_j$, то можно показать, что

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N \hbar\omega_n \left(\hat{a}_n^+ \hat{a}_n + \frac{1}{2} \right). \quad (411)$$

Убедитесь в этом самостоятельно.

Для дальнейшего важно, что решение стационарного уравнения Шредингера, которое следует из (397), можно понимать следующим образом. Основное состояние определяется как обычно для осциллятора. Только теперь у нас много осцилляторов и для каждого надо выбрать основное состояние:

$$\hat{a}_n |\psi_0\rangle = 0, \quad \forall n = \overline{1, N}. \quad (412)$$

Оно имеет энергию:

$$\hat{H} |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle, \quad E_0 = \sum_{n=1}^N \frac{\hbar \omega_n}{2}, \quad (413)$$

которая называется энергией нулевых колебаний. Это минимальная энергия системы, от которой мы будем отсчитывать возбуждения.

Простейшее возбужденное состояние в системе (411) получается действием одного из операторов \hat{a}_n^+ на основное. Например,

$$|\psi_{1n}\rangle = \hat{a}_n^+ |\psi_0\rangle. \quad (414)$$

В таком состоянии возбужден n -й осциллятор и мы имеем волну:

$$\phi_j(t) = \sqrt{\frac{\hbar \bar{c}^2}{2N\omega_n}} e^{-i\omega_n t + \frac{ij n}{N}}, \quad (415)$$

у которой укладывается целое число полувольт на окружности изображенной на рис. 24. Такое состояние имеет энергию:

$$\hat{H} |\psi_{1n}\rangle = (E_0 + E_{1n}) |\psi_{1n}\rangle, \quad (416)$$

а сама волна несет энергию $E_{1n} = \hbar \omega_n$ над E_0 . Это возбуждение n -го осциллятора. Состояние же

$$|\psi_{1n,1n'}\rangle = \hat{a}_n^+ \hat{a}_{n'}^+ |\psi_0\rangle \quad (417)$$

описывает комбинацию из двух волн и так далее.

Видно, что операторы \hat{a}_n^+ и \hat{a}_n рождают и уничтожают кванты в соответствующих состояниях, то есть меняют заселенность n -го

осциллятора. Теперь вероятно должно быть понятно почему обсуждаемая процедура называется вторичным квантованием — операторы \hat{a}_n^+ рождают кванты, каждый из которых уже является (первично) квантованной частицей — волной вероятности (415).

4. Теперь перейдем к обсуждению непрерывного предела. По аналогии с (408) запишем оператор поля (обобщенной координаты) как:

$$\hat{\phi}(t, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar \bar{c}^2}{2\omega_k}} \left[\hat{a}_k e^{-i\omega_k t + i k x} + \hat{a}_k^+ e^{i\omega_k t - i k x} \right], \quad (418)$$

где $\omega_k = \bar{c} |k|$.

Соответственно коммутационные соотношения операторов рождения и уничтожения должны иметь вид:

$$\left[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^+ \right] = 2\pi \delta(k - k'), \quad \left[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'} \right] = \left[\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}^+ \right] = 0, \quad (419)$$

чтобы оператор поля (418) и сопряженный ему импульс:

$$\begin{aligned} \hat{\pi}(t, x) &\equiv \dot{\hat{\phi}}(t, x) = \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar \omega_q}{2\bar{c}^2}} \left[\hat{a}_q e^{-i\omega_q t + i q x} - \hat{a}_q^+ e^{i\omega_q t - i q x} \right], \end{aligned} \quad (420)$$

коммутировали бы каноническим образом:

$$\begin{aligned} \left[\hat{\phi}(t, x), \hat{\pi}(t, y) \right] &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\omega_q}{\omega_k}} \times \\ &\times \left\{ \left[\hat{a}_k, \hat{a}_q^+ \right] e^{-i\omega_k t + i k x} e^{i\omega_q t - i q y} - \right. \\ &\left. - \left[\hat{a}_k^+, \hat{a}_q \right] e^{i\omega_k t - i k x} e^{-i\omega_q t + i q y} \right\} = \\ &= -i \frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{2\pi} \times \\ &\times \left\{ 2\pi \delta(k - q) e^{i k (x - y)} + 2\pi \delta(k - q) e^{-i k (x - y)} \right\} = \\ &= -i \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{i k (x - y)} = -i \hbar \delta(x - y). \end{aligned} \quad (421)$$

Далее, как следует из (399), гамильтониан имеет вид:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[\hat{\pi}^2 + (\hat{\phi}')^2 \right] = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \hbar \omega_k \left(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \right).\end{aligned}\quad (422)$$

Его можно переписать в канонической форме, используя коммутационные соотношения (419):

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \hbar \omega_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \delta(0) \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\hbar \omega_k}{2},\quad (423)$$

где $\delta(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi}$ — это объем пространства, а интеграл

$$\epsilon_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{\hbar \omega_k}{2}$$

— это энергия нулевых колебаний, приходящаяся на единичный объем. В такой форме очевидно она равна бесконечности. Поэтому бесконечна и полная энергия нулевых колебаний:

$$\hat{H} |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle, \quad E_0 = \delta(0) \epsilon_0.\quad (424)$$

Это очевидно происходит по двум причинам: бесконечен объем пространства, а также в спектре присутствуют моды произвольно большой частоты.

Скорее всего в реальной физической ситуации и $V < \infty$ и $k_{max} < \infty$, но как согласовать эти факты с фундаментальными симметриями? Например, можно считать, что теория (422) получается в пределе из рассмотренной выше цепочки шариков (411), в которой и $V < \infty$ и $k_{max} < \infty$ на любом шаге. Возможно тогда трансляционная и вращательная симметрии в задаче появляются только при рассмотрении волн достаточно большой длины. Но так ли это происходит на самом деле в теориях вроде электродинамики?

Однако в отсутствии гравитации наличие энергии у основного состояния не является проблемой, так как энергию системы (422) все равно необходимо отсчитывать от E_0 . В присутствии же гравитации наличие E_0 приводит к так называемой проблеме космологической постоянной, обсуждение которой выходит за рамки нашего курса.

В отсутствии гравитации обычно гамильтониан записывают в так называемом нормально упорядоченном виде:

$$: \hat{H} := \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \hbar \omega_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k, \quad (425)$$

где всегда операторы \hat{a}^+ стоят левее операторов \hat{a} . В нашей конкретной ситуации это означает отбрасывания бесконечного вклада в энергию и тогда основное состояние:

$$\hat{a}_k |\psi_0\rangle = 0, \quad \forall k \in R,$$

имеет нулевую энергию : $\hat{H} : |\psi_0\rangle = 0$. В такой ситуации операторы \hat{a}_k^+ рождают кванты поля (его собственные колебания) с волновыми векторами k и энергиями $E_k = \hbar \omega_k$.

5. Рассмотрев модельную ситуацию двумерного скалярного поля, перейдем теперь к квантованию электромагнитного поля в четырехмерном пространстве–времени. Оператор поля в этом случае можно представить как:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\vec{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^2 \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{2\omega_k}} \left(\hat{a}_{\vec{k},\alpha} \vec{e}_\alpha e^{-i\omega_k t + i\vec{k}\vec{x}} + \right. \\ \left. + \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+ \vec{e}_\alpha^* e^{i\omega_k t - i\vec{k}\vec{x}} \right), \quad \omega_k = c |\vec{k}|, \end{aligned} \quad (426)$$

где $\alpha = 1, 2$ нумеруют две поляризации фотона (монохроматической плоской волны), а \vec{e}_α — это комплексный вектор поляризации. В отличие от квантов обсуждавшегося выше двумерного скалярного поля, электромагнитные волны имеют поляризацию, которая связана со спином фотона. Соответственно, оператор $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+$ рождает фотон с поляризацией, отвечающей \vec{e}_α , и волновым вектором \vec{k} . А коммутационные соотношения определяются как:

$$\left[\hat{a}_{\vec{k},\alpha}, \hat{a}_{\vec{k}',\beta}^+ \right] = (2\pi)^3 \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \quad \left[\hat{a}_{\vec{k},\alpha}, \hat{a}_{\vec{k}',\beta} \right] = \left[\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+, \hat{a}_{\vec{k}',\beta}^+ \right] = 0,$$

Как мы знаем, гамильтониан электромагнитного поля имеет вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{8\pi} \int d^3\vec{x} \left(\hat{\vec{E}}^2 + \hat{\vec{B}}^2 \right), \quad (427)$$

где

$$\hat{\vec{E}} = -\frac{1}{c} \partial_t \hat{\vec{A}}, \quad \hat{\vec{B}} = \text{rot } \hat{\vec{A}}. \quad (428)$$

Как видно, фактически роль импульса, сопряженного обобщенной координате $\hat{\vec{A}}$ отвечает оператор электрического поля $\hat{\vec{E}}$:

$$\left[\hat{E}_j(\vec{x}, t), \hat{A}_k(\vec{x}, t) \right] = \delta_{jk} \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}).$$

Соответственно операторы $\hat{\vec{E}}$ и $\hat{\vec{B}}$ можно выразить через $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+$ и $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^-$, подставив в (428) выражение (426). Далее, если подставить полученные выражения в (427), то мы получим, что

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \hbar \omega_k \left(\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+ \hat{a}_{\vec{k},\alpha} + \hat{a}_{\vec{k},\alpha} \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+ \right), \\ &: \hat{H} := \sum_{\alpha=1}^2 \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \hbar \omega_k \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+ \hat{a}_{\vec{k},\alpha}. \end{aligned} \quad (429)$$

Тогда основное состояние определяется как

$$\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^- |0\rangle = 0, \quad \forall \vec{k}, \alpha, \quad : \hat{H} : |0\rangle = 0.$$

А возбужденные состояния поля содержат фотоны различной поляризации \vec{e}_α с различными волновыми векторами \vec{k} .

В заключении этого раздела заметим, что обсуждавшая на самой первой лекции прошлого семестра ситуация с высокой интенсивностью отвечает состоянию с очень большим количеством квантов, то есть такому состоянию, в котором квантовое среднее $\langle \psi | \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+ \hat{a}_{\vec{q},\beta} | \psi \rangle$ велико для некоторого распределения волновых векторов и поляризаций. А низкая интенсивность наоборот — маленькой заселенности.

6. Перейдем теперь к обсуждению взаимодействия электромагнитного поля с электронами, которое необходимо понимать для описания атомных термов. Как мы показали при рассмотрении взаимодействия электронов с классическими электромагнитными полями, полный гамильтониан системы имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_f + \hat{V}, \quad (430)$$

\hat{H}_e — гамильтониан системы заряженных электронов (например, входящих в состав атома или молекулы), \hat{H}_f — гамильтониан свободного электромагнитного поля (429), а

$$\hat{V} \approx -\frac{e}{mc} \sum_a \hat{A}(\vec{x}_a, t) \hat{p}_a + \mu_0 \sum_a \hat{B}(\vec{x}_a, t) \hat{s}_a + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_a \hat{A}^2(\vec{x}_a, t) \quad (431)$$

— известная нам часть гамильтониана, которая описывает взаимодействие электронов теперь уже с квантовым электромагнитным полем. Сумма по a ведется по всем электронам в атоме. Поскольку электроны в атомах нерелятивистские, то \hat{V} малое возмущение.

Мы уже обсуждали такой потенциал возмущения, когда рассматривали взаимодействие атомов с классическими электромагнитными полями. Повторим некоторые из замечаний, которые были отчасти сделаны еще тогда и подчеркнем новые моменты. Также как и в случае с постоянными внешними электромагнитными полями третьим вкладом в \hat{V} можно пренебречь. Оценим порядок остальных вкладов в \hat{V} . В электромагнитной волне $B \sim kA$. Соответственно первый член в (431) имеет порядок:

$$V_1 \sim \frac{e}{mc} p_0 A \sim \frac{e^3}{\hbar c} A = \alpha_0 e A.$$

где $p_0 = m e^2 / \hbar$ — характерный импульс электронов в атоме. В то же самое время второе слагаемое в (431) имеет порядок

$$V_2 \sim \frac{e \hbar}{mc} B \sim \alpha_0 \frac{\hbar^2}{m e^2} e k A \sim k a_0 V_1.$$

При этом частоты излучения и поглощения для атомов имеют порядок

$$\omega_0 \sim \frac{E_0}{\hbar} \sim \frac{m e^4}{\hbar^2}.$$

Следовательно

$$k a_0 \sim \frac{\omega_0}{c} a_0 \sim \frac{m e^4}{\hbar^3 c} \frac{\hbar^2}{m e^2} = \alpha_0 = \frac{1}{137} \ll 1.$$

Поэтому в (431) вторым вкладом можно пренебречь по сравнению с первым. В результате, используя (426), оператор возмущения можно записать как:

$$\hat{V} \approx \frac{e}{mc} \sum_a \sum_{\alpha=1}^2 \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \sqrt{\frac{\hbar c^2}{\omega_k}} \times \\ \times \left(\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+ \vec{e}_\alpha^* e^{i\omega_k t - i\vec{k}\vec{x}} + \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^- \vec{e}_\alpha e^{-i\omega_k t + i\vec{k}\vec{x}} \right) \hat{p}_a, \quad (432)$$

где первый вклад под знаком суммы описывает излучение фотона возбужденным атомом, а второй — поглощение фотона атомом.

Обсудим задачу излучения фотона возбужденным атомом. Так как спектр излученного фотона непрерывный, то, как мы уже знаем, формула для вероятности излучения в единицу времени в интервал конечных состояний имеет следующий вид:

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_k) d\nu_f, \quad d\nu_f \equiv k^2 dk d\Omega, \quad (433)$$

где E_i — энергия исходного состояния атома, $E_i > E_f$ — энергия конечного состояния атома. Соответственно:

$$|i\rangle = |\psi_i\rangle |0\rangle, \quad |f\rangle = |\psi_f\rangle |1_{\vec{k},\alpha}\rangle,$$

где $|\psi_{i,f}\rangle$ — начальное и конечное состояние атома, $|0\rangle$ — основное состояние электромагнитного поля, а $|1_{\vec{k},\alpha}\rangle$ — состояние электромагнитного поля, отвечающее наличию одного излученного фотона с волновым вектором \vec{k} и поляризацией α .

Для вычисления среднего V_{fi} от (432), учтем, что

$$\begin{aligned} \langle 1_{\vec{k},\beta} | \hat{a}_{\vec{k}',\alpha}^+ | 0 \rangle &= \langle 0 | \hat{a}_{\vec{k},\beta}^- \hat{a}_{\vec{k}',\alpha}^+ | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | (2\pi)^3 \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{k} - \vec{k}') + \hat{a}_{\vec{k}',\alpha}^+ \hat{a}_{\vec{k},\alpha}^- | 0 \rangle = (2\pi)^3 \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{k} - \vec{k}'), \end{aligned}$$

где мы использовали коммутационные соотношения $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^-$ и $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^+$ и определение состояния $\hat{a}_{\vec{k},\alpha}^- |0\rangle = 0$.

Тогда получаем, что

$$\int \frac{d^3 \vec{k}'}{(2\pi)^3} \langle 1_{\vec{k},\beta} | \hat{a}_{\vec{k}',\alpha}^+ | 0 \rangle = \delta_{\alpha\beta}.$$

После чего из (433) следует:

$$dw_{fi} = \frac{c^2}{2\pi\omega_k} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \left| \left\langle \psi_f \left| \vec{e}_\alpha^* \sum_a \hat{p}_a e^{-i\vec{k}\vec{x}_a} \right| \psi_i \right\rangle \right|^2 \times \\ \times \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_k) k^2 dk d\Omega. \quad (434)$$

В дальнейших преобразованиях учтем малый параметр $ka_0 \ll 1$, присутствующий в нашей задаче, и положим $e^{-i\vec{k}\vec{x}_a} \rightarrow 1$. То же самое мы делали в случае классического поля.

Далее, матричный элемент

$$\left\langle \psi_f \left| \hat{p}_a \right| \psi_i \right\rangle = im\omega_{fi} \left\langle \psi_f \left| \vec{x}_a \right| \psi_i \right\rangle, \quad \omega_{fi} = \frac{E_i - E_f}{\hbar},$$

мы нашли, когда обсуждали атом взаимодействующий с классическими электромагнитными полями.

Теперь, если ввести оператор дипольного момента $\sum_a e\vec{x}_a = \vec{d}$, то из (434) мы получим:

$$dw_{fi} = \frac{\omega_{fi}^2}{2\pi\hbar c^3} \left| \left(\vec{e}_\alpha^*, \vec{d}_{fi} \right) \right|^2 \delta(\omega_{fi} - \omega_k) \omega_k d\omega_k d\Omega. \quad (435)$$

Здесь мы перешли от интегрирования по dk к интегрированию по $d\omega_k$, где $\omega_k = ck$ и ввели обозначение $\vec{d}_{fi} \equiv \left\langle \psi_f \left| \vec{d} \right| \psi_i \right\rangle$ и $\vec{d}_{fi} = \vec{d}_{if}^*$. Далее, выполняя интегрирование по $d\omega_k$ и суммирование по поляризациям α , то есть суммируя по всем состояниям излученного фотона, мы получаем следующее выражение для углового распределения:

$$\frac{dw_{fi}}{d\Omega} = \frac{\omega_{fi}^3}{2\pi\hbar c^3} \sum_{\alpha=1}^2 \left| \left(\vec{e}_\alpha, \vec{d}_{if} \right) \right|^2. \quad (436)$$

Вычислим сумму по α в этом выражении. Так как $\vec{e}_{1,2}$ и $\vec{n} = \vec{k}/k$ составляют ортонормированный репер, то

$$\vec{d} = \vec{e}_1 \left(\vec{e}_1, \vec{d} \right) + \vec{e}_2 \left(\vec{e}_2, \vec{d} \right) + \vec{n} \left(\vec{n}, \vec{d} \right).$$

Тогда

$$\vec{d}^2 = \left(\vec{e}_1, \vec{d} \right)^2 + \left(\vec{e}_2, \vec{d} \right)^2 + \left(\vec{n}, \vec{d} \right)^2,$$

и, соответственно,

$$\left(\vec{e}_1, \vec{d}\right)^2 + \left(\vec{e}_2, \vec{d}\right)^2 = \vec{d}^2 - \left(\vec{n}, \vec{d}\right)^2 = \left[\vec{d} \times \vec{n}\right]^2.$$

Поэтому

$$\frac{dw_{fi}}{d\Omega} = \frac{\omega_{fi}^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \left[\vec{d}_{if} \times \vec{n} \right] \right|^2, \quad (437)$$

а полная вероятность излучения, соответственно, равна:

$$w_{fi} = \frac{4\omega_{fi}^3}{3\hbar c^3} \left| \vec{d}_{if} \right|^2.$$

В таком случае интенсивность излучения определяется как

$$I = \hbar\omega_{fi} w_{fi} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{fi}^4}{c^3} \left| \vec{d}_{if} \right|^2, \quad (438)$$

что в два раза превышает классическую интенсивность излучения в дипольном приближении $I = \frac{2}{3} \frac{\vec{d}^2}{c^3}$ из-за наличия двух поляризаций у фотона.

Оценим характерное время жизни атома в возбужденном состоянии $\tau \sim \frac{1}{w_{fi}}$, где

$$w_{fi} \sim \frac{m^3 e^{12}}{\hbar^9 c^3} e^2 a_0^2 \sim \frac{e^8 m e^2}{\hbar^6 c^3} = \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{m e^4}{\hbar^3} \sim \alpha_0^3 \omega_0,$$

где $\omega_0 \sim 10^{15} c^{-1}$, поэтому $\tau \sim 10^{-9} c$. Безусловно это верно, только если $\vec{d}_{fi} \neq 0$, то есть переход между уровнями атома возможен.

7. Обсудим теперь так называемые правила отбора в дипольном приближении (или для дипольного излучения), то есть условия, при которых $\vec{d}_{fi} \neq 0$. Иными словами, определим в дипольном приближении возможные переходы между уровнями атома. Состояния $|i, f\rangle \equiv |\psi_{i,f}\rangle$, переходы между которыми и происходят, характеризуются следующими квантовыми числами: L, S, J, M в слабом поле и L, m, S, m_S в сильном поле. Это необходимо иметь ввиду при получении правил отбора, так как правила отбора накладываются на те квантовые числа, которые характеризуют состояния атома во внешних однородных полях или без них, а также с учетом поправок или без них.

- *Правило отбора по полному спину:*

Очевидно, что $[\hat{s}^2, \hat{d}_j] = 0$, $j = \overline{1, 3}$. Поэтому

$$0 = \langle f | \hat{s}^2 \hat{d}_j - \hat{d}_j \hat{s}^2 | i \rangle = [s_f (s_f + 1) - s_i (s_i + 1)] \langle f | \hat{d}_j | i \rangle.$$

То есть чтобы $\vec{d}_{fi} \equiv \langle f | \hat{d} | i \rangle$ не был равен нулю, необходима неизменность спина, $s_f = s_i$ или $\Delta s = 0$, при излучении.

- *Правило отбора по конфигурации:*

Так как при инверсии мы имеем, что $\hat{I} \vec{x} = -\vec{x}$, то $\hat{I} \vec{d} = -\vec{d}$. При этом, так как $\hat{I}(\theta, \varphi) = (\pi - \theta, \pi + \varphi)$, то

$$\hat{I} \psi_{nlm}(\vec{x}) = (-1)^l \psi_{nlm}(\vec{x}).$$

А для полного состояния атома, содержащего много электронов, собственное число оператора \hat{I} имеет вид: $\lambda = (-1)^{\sum_a l_a}$. Далее,

$$[\hat{I}, \vec{x}] \psi_{nlm}(\vec{x}) = \hat{I} \vec{x} \psi_{nlm}(\vec{x}) - \vec{x} \hat{I} \psi_{nlm}(\vec{x}) = -2 \vec{x} \psi_{nlm}(\vec{x}).$$

Поэтому операторы электрического дипольного момента и инверсии антикоммутируют $\hat{I} \vec{d} + \vec{d} \hat{I} = 0$. А тогда

$$0 = \langle f | \hat{I} \vec{d} + \vec{d} \hat{I} | i \rangle = (\lambda_f + \lambda_i) d_{fi}.$$

В результате в этом случае правило отбора гласит, что при излучении четность состояния обязательно должна измениться $\lambda_f = -\lambda_i$.

- *Правила отбора по проекции полного момента:*

Так как $[\hat{s}_j, \hat{d}_k] = 0$, то

$$[\hat{J}_j, \hat{d}_k] = [\hat{L}_j, \hat{d}_k] = i \epsilon_{jkl} \hat{d}_l, \quad (439)$$

что является преобразованием вектора \hat{d}_j при вращениях. Из этого соотношения следует, что $[\hat{J}_z, \hat{d}_z] = 0$. Поэтому

$$0 = \langle f | [\hat{J}_z \hat{d}_z] | i \rangle = (M_f - M_i) d_{fi},$$

Поэтому $\Delta M = 0$, если происходят переходы между состояниями с определенной проекцией момента на третью ось.

Введем $\hat{d}_\pm = \hat{d}_x \pm i \hat{d}_y$. Тогда из (439) имеем, что $[\hat{J}_z, d_+] = d_+$. Откуда получаем, что

$$(M_f - M_i) \langle f | \hat{d}_+ | i \rangle = \langle f | \hat{d}_+ | i \rangle$$

или

$$(M_f - M_i - 1) \langle f | \hat{d}_+ | i \rangle = 0.$$

Следовательно $\Delta M = 1$, а для d_- получаем $\Delta M = -1$. Собирая все вместе, получаем, что

$$\Delta M = 0, \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \quad (440)$$

в зависимости от того какое квантовое число входит в полный набор, определяющий состояние: J или L .

- *Правила отбора по полному моменту или по орбитальному моменту:*

Вычислим следующий коммутатор:

$$\left[\hat{J}^2, \left[\hat{J}^2, \hat{d}_j \right] \right] = 2 \left(\hat{J}^2 \hat{d}_j + \hat{d}_j \hat{J}^2 \right) - 4 \left(\hat{J}, \hat{d} \right) \hat{J}_j. \quad (441)$$

Аналогичный коммутатор с \hat{d}_j можно вычислить и для \hat{L}^2 . Пусть, теперь, $J_i = J_f = J$, тогда: $\langle f | \left[\hat{J}^2, \left[\hat{J}^2, \hat{d}_j \right] \right] | i \rangle = 0$. Тогда из (441) имеем, что

$$J(J+1) \langle f | d_j | i \rangle = \langle f | \left(\hat{J}, \hat{d} \right) \hat{J}_j | i \rangle. \quad (442)$$

Для выполнения этого равенства и $\vec{d}_{fi} \neq 0$ нужно, чтобы $J_f = J_i$ или $L_f = L_i$.

Пусть теперь $J_f \neq J_i$. Тогда из того, что $\left[\left(\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{d}} \right), \hat{J}_j \right] = 0$, $\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_j \right] = 0$ и $\left[\left(\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{d}} \right), \hat{\vec{J}}^2 \right] = 0$, следует

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \left(\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{d}} \right) \hat{J}_j \right] = 0.$$

Беря матричный элемент этого соотношения, получаем:

$$\left[J_f (J_f + 1) - J_i (J_i + 1) \right] \left\langle f \left| \left(\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{d}} \right) \hat{J}_j \right| i \right\rangle = 0.$$

Так как $J_f \neq J_i$, то

$$\left\langle f \left| \left(\hat{\vec{J}}, \hat{\vec{d}} \right) \hat{J}_j \right| i \right\rangle = 0. \quad (443)$$

Вычислим теперь матричный элемент соотношения (441) с учетом полученного равенства:

$$\left\langle f \left| \left[\hat{\vec{J}}^2, \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{d}_j \right] \right] \right| i \right\rangle = \left[J_f (J_f + 1) - J_i (J_i + 1) \right] \left\langle f \left| \hat{d}_j \right| i \right\rangle$$

и

$$\left\langle f \left| 2 \left(\hat{\vec{J}}^2 \hat{d}_j + \hat{d}_j \hat{\vec{J}}^2 \right) \right| i \right\rangle = 2 \left[J_f (J_f + 1) + J_i (J_i + 1) \right] \left\langle f \left| \hat{d}_j \right| i \right\rangle.$$

Таким образом, собирая все вместе, получаем, что

$$(J_f - J_i + 1) (J_f - J_i - 1) (J_f + J_i) (J_f + J_i + 2) \left\langle f \left| \hat{d}_j \right| i \right\rangle = 0.$$

Тогда с учетом $J_i = J_f$, из этого соотношения получаем:

$$\Delta J = 0, \pm 1, \quad \Delta L = 0, \pm 1,$$

если вместо J надо использовать L .

- *Запрет 0 – 0 перехода:*

Пусть $J_f = J_i = 0$. Тогда матричный элемент соотношения (439) равен:

$$0 = \langle J_f = 0 \left| \left[\hat{J}_j, \hat{d}_k \right] \right| J_i = 0 \rangle = i \epsilon_{jkl} \langle J_f = 0 \left| \hat{d}_l \right| J_i = 0 \rangle.$$

Следовательно, получаем, что

$$\langle J_f = 0 \left| \hat{d}_l \right| J_i = 0 \rangle = 0,$$

то есть переходы с $J_i = J_f = 0$ и $L_i = L_f = 0$ запрещены.

ХIII. Лекция. Матрица плотности, чистые и смешанные состояния, эксперимент Эйнштейна–Подольского–Розена, неравенства Белла, телепортация состояний.

1. На этой лекции мы обсудим матрицу плотности и отличия смешанных и чистых состояний. Рассмотрим систему в некотором состоянии $|\psi\rangle$, которое мы можем разложить по полному базису собственных векторов какой-то эрмитового оператора:

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle, \quad \sum_n |C_n|^2 = 1. \quad (444)$$

Как обычно, если спектр непрерывный, то под суммой \sum_n подразумевается интеграл.

Используя это разложение состояния, среднее произвольного оператора \hat{f} можно записать как:

$$\begin{aligned} \langle \hat{f} \rangle &\equiv \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle = \sum_{n,n'} \langle n' | C_{n'}^* \hat{f} C_n | n \rangle = \sum_{n,n'} f_{n'n} C_{n'}^* C_n, \\ f_{n'n} &\equiv \langle n' | \hat{f} | n \rangle. \end{aligned}$$

Теперь, если ввести матрицу $\rho_{n'n} \equiv C_{n'}^* C_n$, то рассматриваемое среднее переписется следующим образом:

$$\langle \hat{f} \rangle = \sum_{n,n'} f_{n'n} \rho_{nn'} = \text{Tr} \hat{f} \hat{\rho}_c, \quad (445)$$

где в данном случае

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_c &= \sum_{n,n'} \rho_{nn'} |n\rangle \langle n'| = \sum_{n,n'} C_n C_{n'}^* |n\rangle \langle n'| = \\ &= \sum_n C_n |n\rangle \sum_{n'} C_{n'}^* \langle n'| = |\psi\rangle \langle \psi|. \end{aligned} \quad (446)$$

Оператор $\hat{\rho}_c$ называется матрицей плотности.

Нетрудно проверить, что для оператора $\hat{\rho}_c$ данного вида верно следующее равенство:

$$(\hat{\rho}_c)^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = |\psi\rangle\langle\psi||\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}_c. \quad (447)$$

То есть $\hat{\rho}_c$ является проектором на состояние $|\psi\rangle$. Именно поэтому верно равенство:

$$\langle\hat{f}\rangle = \text{Tr} \hat{f} \hat{\rho}_c = \langle\psi|\hat{f}|\psi\rangle,$$

Обсудим еще несколько простых свойств оператора $\hat{\rho}_c$. Во-первых,

$$\hat{\rho}_c^+ = \sum_{n,n'} (C_n C_{n'}^*)^* (|n\rangle\langle n'|)^+ = \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} |n'\rangle\langle n| = \hat{\rho}_c, \quad (448)$$

то есть $\hat{\rho}_c$ эрмитов. Во-вторых, его след равен единице:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho}_c &= \sum_{n''} \langle n'' | \hat{\rho}_c | n'' \rangle = \sum_{n,n',n''} \langle n'' | C_n^* C_{n'} | n' \rangle \langle n | n'' \rangle = \\ &= \sum_{n,n',n''} C_n^* C_{n'} \delta_{n''n} \delta_{n'n''} = \sum_n |C_n|^2 = 1. \end{aligned} \quad (449)$$

Итак, мы определили матрицу плотности, которая отвечает чистому состоянию $|\psi\rangle$.

2. Выше мы рассматривали одну систему и, соответственно, чистое состояние. Это мог быть, например, один спин. В таком случае $|n\rangle = |\pm\rangle$.

Пусть теперь система состоит из N подсистем. Например, можно рассмотреть N спинов. Пусть каждая из подсистем $a = \overline{1, N}$ может находиться в каком-то из состояний

$$|\psi^a\rangle = \sum_n C_n^a |n\rangle, \quad \sum_n |C_n^a|^2 = 1, \quad (450)$$

с вероятностью w_a . Так как w_a это вероятности, то

$$\sum_{a=1}^N w_a = 1, \quad w_a \geq 0. \quad (451)$$

Теперь в состоянии $|\psi^a\rangle$ среднее от какого-то оператора равно

$$\langle \hat{f} \rangle_a = \langle \psi^a | \hat{f} | \psi^a \rangle. \quad (452)$$

Тогда среднее величины \hat{f} по ансамблю N систем равно:

$$\langle \langle \hat{f} \rangle \rangle = \sum_{a=1}^N w_a \langle \hat{f} \rangle_a = \sum_{a=1}^N w_a \langle \psi^a | \hat{f} | \psi^a \rangle, \quad (453)$$

так как в состоянии $|\psi^a\rangle$ находится w_a -я часть из всего набора N подсистем.

Подставляя в (453) разложение (450), получаем:

$$\langle \langle \hat{f} \rangle \rangle = \sum_{a=1}^N w_a \sum_{n,n'} f_{n'n} C_{n'}^{a*} C_n^a,$$

так как $f_{n'n}$ для всех a одно и то же, то

$$\langle \langle \hat{f} \rangle \rangle = \sum_{n,n'} f_{n'n} \sum_{a=1}^N w_a C_{n'}^{a*} C_n^a \equiv \text{Tr}(\hat{f} \hat{\rho}), \quad (454)$$

где

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{n,n'} \sum_{a=1}^N w_a C_{n'}^{a*} C_n^a |n\rangle \langle n'| \equiv \sum_{n,n'} \rho_{nn'} |n\rangle \langle n'|, \quad (455)$$

где $\rho_{nn'} = \sum_{a=1}^N w_a C_{n'}^{a*} C_n^a$.

Нетрудно видеть, что $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$, а также

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_n \rho_{nn} = \sum_{a=1}^N w_a \sum_n |C_n^a|^2 = \sum_a w_a = 1. \quad (456)$$

Помимо этого, $\rho_{nn} \geq 0$, так как $w_a \geq 0$ и $|C_n^a|^2 \geq 0$. Далее

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{n,n'} \sum_{m,m'} \rho_{nn'} \rho_{mm'} |n\rangle \langle n'| |m\rangle \langle m'|.$$

Поскольку состояния в различных системах ортогональны $\langle n'|m\rangle = \delta_{n'm}$, получаем, что

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{n,m,m'} \rho_{nm} \rho_{mm'} |n\rangle \langle m'| \neq \hat{\rho}.$$

То есть в отличие от соотношения (447) для одной системы, в случае ансамбля многих систем мы имеем, что

$$\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}. \quad (457)$$

Далее

$$\text{Tr} \hat{\rho}^2 = \sum_{a=1}^N w_a^2 \sum_n |C_n^a|^2 = \sum_{a=1}^N w_a^2 \leq 1. \quad (458)$$

Равенство здесь выполняется только когда для одной какой-то подсистемы a_0 мы имеем $w_{a_0} = 1$, а для всех остальных $w_{a \neq a_0} = 0$.

Таким образом, мы определили матрицу плотности для смешанного состояния и увидели, по каким ключевым свойствам она отличается от $\hat{\rho}_c$ для чистого состояния.

3. Итак, перечислим основные свойства матрицы плотности, часть из которых нам уже известна:

1. Матрица плотности $\hat{\rho}$ эрмитова:

$$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}, \quad \rho_{n'n} = \rho_{nn}^*$$

2. След матрицы плотности равен единице:

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_n \rho_{nn} = 1.$$

3. Так как матрица плотности является эрмитовым оператором, то ее всегда можно диагонализировать унитарным преобразованием:

$$\hat{S}^+ \hat{\rho} \hat{S} = \sum_{\nu} \rho_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu|,$$

в некотором базисе $|\nu\rangle$. Как мы видели, для чистого состояния $\rho_{\nu_0} = 1$, а $\rho_{\nu \neq \nu_0} = 0$ для некоторого базиса $|\nu\rangle$.

4. Матрица плотности положительно определена. Действительно, рассмотрим среднее от $\hat{\rho}$ по некоторому состоянию системы:

$$\langle \chi | \hat{\rho} | \chi \rangle = \sum_{\nu} \rho_{\nu} \langle \chi | \nu \rangle \langle \nu | \chi \rangle = \sum_{\nu} \rho_{\nu} |\langle \nu | \chi \rangle|^2 \geq 0.$$

А физический смысл диагонального матричного элемента $\hat{\rho}$ скажем по состоянию $|\chi\rangle$ — это вероятность найти всю систему в чистом состоянии $|\chi\rangle$ при измерении. То есть

$$\langle \chi | \hat{\rho} | \chi \rangle = w_{\chi}, \quad \text{Tr} \hat{\rho} = \sum_{\chi} w_{\chi} = 1$$

5. Свойство (3) с учетом (2) и (4) приводит к следующему свойству:

$$\sum_{\nu} \rho_{\nu}^2 = \sum_{\nu} w_{\nu}^2 \leq \left(\sum_{\nu} w_{\nu} \right)^2 = \left(\sum_{\nu} \rho_{\nu} \right)^2 = (\text{Tr} \hat{\rho})^2 = 1.$$

Что в инвариантной форме выглядит как $\text{Tr} \hat{\rho}^2 \leq 1$, а равенство выполняется только для чистого состояния. То есть $\text{Tr} \hat{\rho}^2 \equiv \mu$ можно рассматривать как параметр определяющий чистоту состояния.

6. По определению

$$\langle\langle \hat{f} \rangle\rangle \equiv \text{Tr} \hat{f} \hat{\rho},$$

и $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ означает одновременное усреднение по квантовым состояниям каждой из подсистем и статистическое усреднение по ансамблю, по которому эти подсистемы распределены.

7. Эволюция оператора $\hat{\rho}$ во времени очевидно определяется как:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) &= \sum_{a=1}^N w_a |\Psi_a(t)\rangle \langle \Psi_a(t)| = \\ &= \sum_{a=1}^N w_a \hat{U}(t) |\Psi_a(0)\rangle \langle \Psi_a(0)| \hat{U}^+(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^+(t), \end{aligned}$$

что отвечает представлению Шредингера для $|\Psi\rangle$. Следовательно,

$$\partial_t \hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}(t)].$$

В частности:

$$\begin{aligned} \langle \langle \hat{f}(t) \rangle \rangle &= \text{Tr} (\hat{f} \hat{\rho}(t)) \equiv \text{Tr} (\hat{f} \hat{U}(t) \hat{\rho}(0) \hat{U}^+(t)) = \\ &= \text{Tr} (\hat{U}^+(t) \hat{f} \hat{U}(t) \hat{\rho}(0)) = \text{Tr} \hat{F}(t) \hat{\rho}(0), \end{aligned}$$

где $\hat{F}(t)$ — это эволюция оператора \hat{f} в гейзенберговском представлении.

4. Обсудим некоторые примеры. Рассмотрим для начала матрицу плотности для частицы со спином $1/2$. Это должна быть 2×2 матрица вида:

$$\hat{\rho} = \sum_{s,s'=\pm} \rho_{ss'} |s\rangle \langle s'|.$$

Любая такая 2×2 матрица может быть представлена в виде:

$$\hat{\rho} = a \hat{\mathbf{1}} + \sum_{i=1}^3 b_i \hat{\sigma}_i,$$

где $\hat{\sigma}_i$ — это матрицы Паули, а физический смысл чисел $a, b_i, i = \overline{1,3}$ мы сейчас определим. Так как $\text{Tr} \hat{\sigma}_i = 0$, а $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$, то

$$\text{Tr} \hat{\rho} = 2a = 1, \quad a = \frac{1}{2}.$$

Далее среднее значение спина выражается через

$$\langle \hat{\vec{\sigma}} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{\vec{\sigma}} = \vec{P},$$

что является поляризацией. Но

$$\text{Tr} \hat{\rho} \hat{\sigma}_j = \sum_{k=1}^3 b_k \text{Tr} \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j = 2b_j.$$

Откуда получаем, что

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{1}} + \vec{P} \hat{\vec{\sigma}}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_- \\ P_+ & 1 - P_z \end{pmatrix}$$

где $P_{\pm} = P_x \pm iP_y$.

Далее при ограничении системы на ее подсистему чистое состояние полной системы приводит к смешанному для подсистемы. Действительно, пусть имеется система состоящая из двух подсистем, находящаяся в состоянии вида:

$$|\psi\rangle = A_1 |\phi_1\rangle |\chi_1\rangle + A_2 |\phi_2\rangle |\chi_2\rangle, \quad (459)$$

где $|\phi_{1,2}\rangle$ — это два ортогональных вектора относящиеся к первой подсистеме (например, два состояния спина $|\pm\rangle$), а $|\chi_{1,2}\rangle$ — два ортогональных вектора, описывающие вторую подсистему. Здесь можно иметь ввиду ситуацию аналогичную той, что мы встречаем в термодинамике, когда рассматривается маленькая подсистема и термостат. В (459) комплексные амплитуды вкладов в суперпозицию состояний можно записать как:

$$A_{1,2} = \sqrt{p_{1,2}} e^{i\alpha_{1,2}}, \quad \alpha_{1,2} \in [0, 2\pi), \quad p_{1,2} \in R_+,$$

и

$$|A_1|^2 + |A_2|^2 = p_1 + p_2 = 1.$$

Матрица плотности для рассматриваемого чистого состояния полной системы имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = |\psi\rangle \langle\psi| = & A_1 A_1^* |\phi_1\rangle |\chi_1\rangle \langle\chi_1| \langle\phi_1| + A_2 A_2^* |\phi_2\rangle |\chi_2\rangle \langle\chi_2| \langle\phi_2| + \\ & + A_1 A_2^* |\phi_1\rangle |\chi_1\rangle \langle\chi_2| \langle\phi_2| + A_2 A_1^* |\phi_2\rangle |\chi_2\rangle \langle\chi_1| \langle\phi_1|. \end{aligned} \quad (460)$$

Возьмем теперь частичный след по состояниям второй подсистемы от $\hat{\rho}$. Таким образом мы найдем матрицу плотности $\hat{\rho}_1$ первой подсистемы:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_1 \equiv \text{tr}_2 |\psi\rangle \langle\psi| & \equiv \sum_{i=1}^2 \langle\chi_i| |\psi\rangle \langle\psi| |\chi_i\rangle = \\ & = |A_1|^2 |\phi_1\rangle \langle\phi_1| \langle\chi_1|\chi_1\rangle^2 + |A_2|^2 |\phi_2\rangle \langle\phi_2| \langle\chi_2|\chi_2\rangle^2 + 0 + 0 = \\ & = p_1 |\phi_1\rangle \langle\phi_1| + p_2 |\phi_2\rangle \langle\phi_2|. \end{aligned} \quad (461)$$

Видно, что $p_{1,2}$ определяют вероятности подсистемы оказаться в состояниях $|\phi_{1,2}\rangle$. Аналогично

$$\hat{\rho}_2 \equiv \text{tr}_1 |\psi\rangle \langle\psi| = p_1 |\chi_1\rangle \langle\chi_1| + p_2 |\chi_2\rangle \langle\chi_2|. \quad (462)$$

Заметим, что $\hat{\rho} \neq \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2$. Нетрудно видеть, что $\rho_{1,2}$ описывают смешанные, а не чистые состояния.

5. Обсудим так называемый парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена. Мы рассмотрим его формулировку, которая принадлежит другим ученым. Исходная формулировка парадокса была несколько иной.

Пусть нам удалось сформировать систему из двух фермионов в состоянии с полным спином ноль:

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle]. \quad (463)$$

Заметим для общего образования, что это же состояние можно представить в виде:

$$|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\rightarrow\rangle |\leftarrow\rangle - |\leftarrow\rangle |\rightarrow\rangle],$$

где

$$|\rightleftharpoons\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+\rangle \pm |-\rangle].$$

Полная система двух спинов находится в чистом состоянии и описывается матрицей плотности вида (460). При этом состояние каждого спина по отдельности является смешанным. Чаще их называют запутанными (entangled) состояниями. Для их описания необходимо использовать матрицы плотности, как мы видели чуть выше, и не возможно использовать векторы состояний.

Пусть эти два фермиона из (463) разлетелись друг от друга на большое расстояние. При этом когерентность их спиновых состояний не потерялась, то есть спины в процессе разлета не входят во взаимодействие с большими классическими системами.

Если теперь кто-то произведет измерение проекции спина одной из частиц, то ее состояние из смешанного перейдет в чистое: из состояния, которое описывается матрицей плотности вроде $\hat{\rho}_{1,2}$ как в (461) и (462), мы получим чистое состояние, которое описывается вектором. Измерение можно произвести, например, пропустив эту частицу через магнитное поле. Но самое удивительное, и это подтверждается экспериментом, что состояние второго спина в то же самое время, без непосредственного воздействия на него (то есть на расстоянии)

тоже перейдет из смешанного в чистое, с проекцией спина противоположной первому фермиону.

При этом не происходит нарушения причинности, так как результат измерения чисто вероятностный. То есть вы не можете при измерении заставить первый спин оказаться направленным тем или иным образом: в результате измерения он оказывается с какой-то вероятностью направленным, например, вдоль или против внешнего магнитного поля. С такой же вероятностью второй спин оказывается направленным противоположным образом.

Чтобы увидеть почему законы квантовой теории устроены именно так, как мы сейчас описали, обсудим неравенства Белла и их нарушение в рамках квантовой механики.

6. Рассмотрим сначала, как обстоят дела в классической теории вероятностей. Пусть имеется три величины a , b и c , которые зависят от какого-то случайного параметра λ и могут принимать значения ± 1 , как, например, удвоенная проекция спина $1/2$. Зависимость от случайной величины λ означает, что

$$\langle a \rangle \equiv \int_{\Lambda} d\mu(\lambda) a(\lambda),$$

и аналогично для b и c . Здесь Λ — это область значений, которые принимает λ , а $d\mu(\lambda)$ — мера интегрирования, которая определяет с каким вероятностным весом берется то или иное значение λ .

В такой ситуации имеем, что:

$$\begin{aligned} \left| \langle ab \rangle + \langle cb \rangle \right| &= \left| \langle (a + c) b \rangle \right| = \\ &= \left| \langle (a + c) a^2 b \rangle \right| = \left| \langle (1 + ac) ab \rangle \right| \leq 1 + \langle ac \rangle, \end{aligned}$$

где мы использовали, что $a^2 = 1$, $ab = \pm 1$ и $1 + ac \geq 0$. Таким образом, в случае классического (вероятностного) распределения по ансамблю мы получаем, что:

$$\left| \langle ab \rangle + \langle cb \rangle \right| \leq 1 + \langle ac \rangle. \quad (464)$$

Это неравенства Белла. Их смысл заключается в следующем. Пусть имеется процесс, где некоторая случайная переменная λ пробегает значения из некоторого множества Λ с весом $d\mu(\lambda)$. Однако мы наблюдаем не λ непосредственно, а можем измерять любые комбинации из набора величин $a(\lambda)$, $b(\lambda)$ и $c(\lambda)$, зависящие от случайной λ . Причем

все эти величины могут принимать лишь значения ± 1 . Много раз генерируя значения λ с одинаковым распределением вероятности $d\mu(\lambda)$ мы можем найти корреляторы $\langle ab \rangle$, $\langle bc \rangle$ и $\langle ac \rangle$, которые подчиняются соотношениям вроде (464).

Важно, что в обсуждаемой ситуации, хотя мы и измеряем каждый раз только две величины из трех, третья тоже принимает какое-то определенное значение, хотя и не обязательно известное нам. Таким образом, существует 8 возможных комбинаций значений для величин a, b и c , которые могут принимать только значения ± 1 . Каждой из этих комбинаций мы можем приписать неотрицательную вероятность

$$P(a, b, c) \geq 0, \quad \sum_{a, b, c = \pm 1} P(a, b, c) = 1.$$

В такой ситуации рассматриваемые корреляторы определяются через эти вероятности. Например:

$$\langle ab \rangle = \sum_{c = \pm 1} \left[P(+, +, c) + P(-, -, c) - P(+, -, c) - P(-, +, c) \right].$$

Так устроена ситуация в классической теории вероятностей, в которой есть некоторая случайная величина λ , принимающая в любой момент времени определенное значение.

Теперь покажем, что в случае квантовых спинов неравенство Белла (464) нарушается. Для построения контрпримера используем состояние (463) для двух фермионов с полным спином ноль. Иногда в литературе оно называется ЭПР состоянием в честь Эйнштейна–Подольского–Розена. При этом роль трех случайных величин a, b и c будут играть проекции одного из спинов в состоянии (463) на три оси. А именно, нас интересуют удвоенные проекции этого спина на разные направления. Они как раз и могут принимать значения ± 1 , как в примере с классической вероятностью.

Как мы знаем, если измерить проекцию, скажем, первого спина на ось z в состоянии (463), то с одинаковой вероятностью $1/2$ она окажется равной либо $+1/2$, либо $-1/2$. После такого измерения проекции спинов обеих частиц окажутся однозначно определены, причем их знаки всегда будут противоположны, так как в состоянии (463) полный спин ноль.

Пусть второе измерение определяет проекцию спина той же (первой) частицы на ось повернутую вокруг оси x на угол θ по отношению к оси z , которая использовалась в первом измерении. В такой

ситуации базисные векторы состояний проекции спина для первого и второго измерения имеют вид:

$$|\psi_{1+}\rangle = |+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_{1-}\rangle = |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (465)$$

и

$$|\psi_{2+}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_{2-}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (466)$$

соответственно.

В результате два последовательных измерения удвоенной проекции спина одной из частиц в состоянии (463) на две оси, которые составляют угол θ друг с другом, дают комбинации значений $\pm 1, \pm 1$ со следующими вероятностями:

$$\begin{aligned} P(+, +) &= \frac{1}{2} |\langle \psi_{1+} | \psi_{2+} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}, \\ P(+, -) &= \frac{1}{2} |\langle \psi_{1+} | \psi_{2-} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \\ P(-, +) &= \frac{1}{2} |\langle \psi_{1-} | \psi_{2+} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \\ P(-, -) &= \frac{1}{2} |\langle \psi_{1-} | \psi_{2-} \rangle|^2 = \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}, \end{aligned} \quad (467)$$

Таким образом, коррелятор для проекций спина на указанные оси имеет вид:

$$\begin{aligned} \langle a b \rangle &= P(+, +) - P(-, +) - P(+, -) + P(-, -) = \\ &= \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} = \cos \theta. \end{aligned} \quad (468)$$

Теперь выберем три оси, отвечающие измерениям a, b и c , лежащими в одной плоскости под углом $2\pi/3$ друг к другу. Все три пары осей равноправны и мы получаем из (468), что

$$\langle a b \rangle = \langle b c \rangle = \langle a c \rangle = \cos \frac{2\pi}{3} = -\frac{1}{2}.$$

Тогда

$$\left| \langle ab \rangle + \langle cb \rangle \right| = \left| -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right| = 1, \quad 1 + \langle ac \rangle = \frac{1}{2}.$$

То есть неравенство (464) нарушается.

Таким образом, при вероятностном описании измерений в квантовой механике нельзя ввести какую-то случайную величину λ , которая в каждый момент времени принимает определенное значение. А это, в свою очередь, означает, что в описании спина с использованием матрицы плотности, его проекция на любую ось в каждый момент времени не является определенной.

7. Закончим мы наши лекции обсуждением квантовой телепортации состояний. Будем называть уже известные нам состояния спина q -битами. Пусть у нас есть три q -бита. Первый q -бит в состоянии:

$$|\psi_0\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (469)$$

а два других описываются вектором $|\psi_1\rangle$, который является ЭПР суперпозицией (463). То есть полное состояние системы трех спинов имеет вид:

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha |+\rangle + \beta |-\rangle) [|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle]. \quad (470)$$

Опишем как можно телепортировать состояние (469) от Алисы к Бобу.

В эксперименте предполагается, что Боб создал состояние (463) и один из квантов отправил Алисе, у которой уже есть состояние (469). Алиса, получив вторую частицу, производит измерение над двумя имеющимися у нее q -битами. Измеряется величина, отвечающая двухчастичному оператору:

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^4 n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|, \quad (471)$$

где

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= \frac{|+\rangle |-\rangle - |-\rangle |+\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\Psi_2\rangle &= \frac{|+\rangle |-\rangle + |-\rangle |+\rangle}{\sqrt{2}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\Psi_3\rangle &= \frac{|+\rangle|+\rangle - |-\rangle|-\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\Psi_4\rangle &= \frac{|+\rangle|+\rangle + |-\rangle|-\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (472)$$

Заметим, что $\langle\Psi_n|\Psi_m\rangle = \delta_{nm}$ — полный и ортонормированный базис в системе двух спинов. Чтобы подчеркнуть на какие два из трех спинов действует оператор \hat{A} мы можем явно записать его в виде:

$$\hat{A}_{12} = \hat{A} \otimes \hat{1}.$$

Собственные функции и числа этого оператора имеют вид:

$$\hat{A}_{12} |\Psi_n\rangle |\varphi\rangle = n |\Psi_n\rangle |\varphi\rangle, \quad n = \overline{1,4},$$

где $|\varphi\rangle$ — произвольный двухкомпонентный спинорный вектор состояния, описывающий частицу, которая остается у Боба.

Измеряя \hat{A}_{12} , Алиса определяет одно из чисел $n = \overline{1,4}$. При этом состояние системы после измерения принимает вид $|\Psi_n\rangle |\varphi\rangle$. В этом базисе исходное состояние трех спинов (470) записывается как:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\psi_0\rangle |\psi_1\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha |-\rangle|+\rangle|-\rangle - \alpha |-\rangle|-\rangle|+\rangle + \beta |+\rangle|+\rangle|-\rangle - \beta |+\rangle|-\rangle|+\rangle \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\alpha \frac{|\Psi_2\rangle - |\Psi_1\rangle}{\sqrt{2}} |-\rangle - \alpha \frac{|\Psi_4\rangle - |\Psi_3\rangle}{\sqrt{2}} |+\rangle + \right. \\ &\quad \left. + \beta \frac{|\Psi_4\rangle + |\Psi_3\rangle}{\sqrt{2}} |-\rangle - \beta \frac{|\Psi_2\rangle + |\Psi_1\rangle}{\sqrt{2}} |+\rangle \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left[|\Psi_1\rangle \left(-\alpha |-\rangle - \beta |+\rangle \right) + |\Psi_2\rangle \left(\alpha |-\rangle - \beta |+\rangle \right) + \right. \\ &\quad \left. + |\Psi_3\rangle \left(\beta |-\rangle + \alpha |+\rangle \right) + |\Psi_4\rangle \left(\beta |-\rangle - \alpha |+\rangle \right) \right]. \end{aligned}$$

Таким образом, получаем, что

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^4 \frac{1}{2} |\Psi_n\rangle |\varphi_n\rangle,$$

где

$$\begin{aligned}
|\varphi_1\rangle &= \begin{pmatrix} -\alpha \\ -\beta \end{pmatrix}, & |\varphi_2\rangle &= \begin{pmatrix} \alpha \\ -\beta \end{pmatrix}, \\
|\varphi_3\rangle &= \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix}, & |\varphi_4\rangle &= \begin{pmatrix} \beta \\ -\alpha \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{473}$$

После измерения оператора \hat{A}_{12} частицы 1 и 2, которые имеются у Алисы, с равной вероятностью $\frac{1}{4}$ попадают в одно из четырех состояний $|\Psi_n\rangle$, $n = \overline{1,4}$, а частица 3, которая у Боба, оказывается в соответствующем состоянии $|\varphi_n\rangle$ из (473). Каждый из векторов, который может описывать состояние оказавшееся у Боба, содержит оба числа α и β и может быть превращен в исходное состояние $|\psi_0\rangle$, которое было у Алисы, с помощью унитарного преобразования:

$$|\psi_0\rangle = \hat{U}_n |\varphi_n\rangle,$$

где

$$\hat{U}_1 = -\hat{1}, \quad \hat{U}_2 = \hat{\sigma}_3, \quad \hat{U}_3 = \hat{\sigma}_1, \quad \hat{U}_4 = -i\hat{\sigma}_2.$$

Поскольку состояния все равно определены с точностью до фазовых множителей, то мы можем не обращать на них внимания в определении \hat{U}_n .

Состояние $|\varphi_1\rangle$ фактически совпадает с $|\psi_0\rangle$ с точностью до фазы. Матрицы же \hat{U}_n , $n = 2, 3, 4$ совпадают с операторами поворота на угол π вокруг осей z , x и y , соответственно. Такие повороты можно реализовать, накладывая на определенное время магнитные поля вдоль соответствующих осей и учитывая прецессию спина в магнитном поле.

Таким образом, мы описали как можно телепортировать произвольное состояние спина от Алисы к Бобу. Заметим, что телепортируется именно состояние, а не сама частица, но частицы при этом не отличимы.