

Квантовая механика.

Часть 2

М. Г. Иванов¹

24 декабря 2025 г.

¹Иванов Михаил Геннадьевич. e-mail: ivanov.mg@phystech.su

Оглавление

Предисловие	4
0 Геометрическая прогрессия (л)	6
0.1 Геометрическая прогрессия с комплексным знаменателем	6
0.2 Норма оператора	7
0.3 Область определения оператора	7
0.4 Асимптотические ряды	8
1 Стационарная теория возмущений	9
1.1 Постановка задачи	9
1.2 Невырожденный спектр	10
1.3 Вырожденный спектр	12
1.3.1 Почти вырожденные уровни*	13
1.4 Оператор Грина в дискретном спектре*	14
1.5 Теория возмущений через оператор Грина*	14
1.6 Оператор Грина в непрерывном спектре	16
1.7 От оператора Грина к функции Грина-	17
1.8 Квазистационарные уровни	19
2 Представление взаимодействия	22
2.1 Определение представления взаимодействия	22
2.2 Прецессия спина во вращающемся поле	23
2.2.1 Первая попытка решения	24
2.2.2 Вторая попытка решения	25
2.3 Т-экспонента	25
2.4 Т-экспонента и амплитуды вероятностей**	27
3 Нестационарная теория возмущений	29
3.1 Задача нестационарной теории возмущений	29
3.2 Включающееся и выключающееся возмущение	30
3.3 Включающееся и стабилизирующееся возмущение	30
3.3.1 Мгновенное изменение гамильтониана	32
3.3.2 Адиабатическое изменение гамильтониана	32
3.4 Периодическое возмущение и «золотое правило Ферми»	33
3.5 Соотношение неопределённостей энергия-время	35
4 Сложение моментов → КПКМ-15.5	36
5 Специальная теория относительности в контексте квантовой механики	37
5.1 Обозначения, соглашения, напоминания (л)	37
5.2 От догадки де Бройля к уравнению Шрёдингера	38
5.3 Ковариантные производные	39
5.4 Калибровочные преобразования	41
6 Уравнение Клейна–Фока–Гордона	42
6.1 Свободное уравнение Клейна–Фока–Гордона	42
6.2 Уравнение непрерывности для уравнения КФГ	43
6.2.1 Вспоминаем уравнение непрерывности для уравнения Шрёдингера	43
6.2.2 Вывод уравнения непрерывности для КФГ	43
6.3 Уравнение КФГ в электромагнитном поле*	44

7 Уравнение Дирака	45
7.1 Свободное уравнение Дирака	45
7.2 Уравнение непрерывности для уравнения Дирака	47
7.3 Стационарные состояния для уравнения Дирака	48
7.4 Частицы и античастицы	49
7.5 Момент импульса дираковской частицы	50
7.6 Преобразования Лоренца*	52
7.7 Уравнение Дирака в электромагнитном поле	53
7.8 Уравнение Паули	54
7.8.1 Уравнение непрерывности для уравнения Паули	56
7.9 Спин-орбитальное взаимодействие	56
7.9.1 Классический вывод спин-орбитального взаимодействия	58
8 Тождественные частицы	60
8.1 Перестановочная симметрия	60
8.2 Невзаимодействующие тождественные частицы	60
8.3 Разделение координатных и спиновых переменных	62
8.4 Обменный член	63
8.5 Пространства Фока*	64
8.5.1 Базис в бозонном пространстве Фока	66
8.5.2 Базис в фермионном пространстве Фока	67
8.6 Бозонные операторы рождения и уничтожения	68
8.7 Фермионные операторы рождения и уничтожения	69
8.8 Размышление о коммутативности и антикоммутативности**	71
8.9 Выражение наблюдаемых через операторы рождения-уничтожения*	74
8.10 Как из двух фермионов сделать один бозон?**	75
9 Сложный атом	77
9.1 Вариационный принцип* → КПКМ-4.11	77
9.2 Вариационный метод для атома гелия	77
9.3 Атом гелия	79
9.4 Сложный атом	80
9.4.1 Одноэлектронный базис (спектроскопические символы)	80
9.4.2 Периодический закон**	81
9.4.3 Базис-1 (конфигурации)	82
9.4.4 Базис-2 (термы)	84
9.4.5 Правила Хунда 1, 2	85
9.4.6 Базис-3 (тонкая структура термов)	86
9.4.7 Правило Ланде (правило Хунда 3)	88
9.5 Атом во внешнем магнитном поле	89
10 Теория рассеяния	91
10.1 Постановка задачи рассеяния	91
10.2 Оптическая теорема	92
10.3 Интегральное уравнение рассеяния	94
10.4 Борновское приближение	96
10.5 Фазовая теория рассеяния	97
10.5.1 Рассеяние с поглощением*	99
10.5.2 Рассеяние и поглощение на большом чёрном шаре*	100
10.6 Рассеяние тождественных частиц	101
10.6.1 Факторизуемая волновая функция	102
10.6.2 Рассеяние неполяризованных пучков	103
10.6.3 Рассеяние поляризованных пучков	104
11 Основы теории излучения	106
11.1 Калибровка Кулона	106
11.2 Разложение свободного электромагнитного поля на осцилляторы	107
11.3 Квантование свободного электромагнитного поля	109
11.4 Взаимодействие электромагнитного поля с источниками	110
11.5 Дипольное приближение	110
11.6 Правила отбора для дипольных переходов	113

11.6.1 Отбор по чётности	113
11.6.2 Базис $ S, M_S; L, M_L\rangle$	113
11.6.3 Базис $ S, L; J, M_J\rangle$	114
12 Матрица плотности и теория измерений → КПКМ-4.8,5.3.2,7.4	115
12.1 Чистые и смешанные состояния → КПКМ-4.8	115
12.2 Селективные и неселективные измерения → КПКМ-5.3.2	115
12.3 Квантовый эффект Зенона → КПКМ-7.4	115

Предисловие

Сразу ответим на напрашивающийся вопрос: «Если это вторая часть, то где первая?» Первая часть — это книга «Как понимать квантовую механику» (далее эта книга обозначается как КПКМ). Этот конспект можно рассматривать как продолжение книги КПКМ. В дальнейшем предполагается данный конспект и КПКМ в какой-то форме объединить: сделать двухтомник, или одну толстую книгу, возможно переработав обе части для большего единства стиля.

В данном конспекте изложен (частично) лекционный материал второй части стандартного для МФТИ годового курса квантовой механики для ФРКТ (лектор — М.Г. Иванов).

Первая часть курса читалась на основе 2-го издания книги М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику»¹.

Материал второй части курса покрывается книгой КПКМ только фрагментарно. В разделах, изложенных в КПКМ даны ссылки на соответствующие разделы КПКМ.

Также часть материала изложена в подготавливающейся к изданию книге М.Г. Иванов «Механика и теория поля» (далее эта книга обозначается как МТП).

Ссылки на отдельные разделы этой книги также могут появляться в конспекте. Вопросы, связанные с квантовой механикой обсуждаются в МТП главным образом в части 5 «Механика классическая и квантовая как классическая теория поля».

На книгу МТП также будут идти все ссылки на вопросы связанные с классической механикой и классической теорией поля².

(!!!) В соответствии с принятыми в книге МТП соглашениями мы будем использовать метрику Минковского $\eta_{ij} = \text{diag}(-1, +1, +1, +1)$, т. е. обратным знаком по сравнению с курсом теоретической физики Ландау и Лифшица.

Все формулы записываются в симметричной (гауссовой) системе СГС.

Материалы по курсу, включая этот конспект, как и раньше будут выкладываться на Яндекс-диск.

Этот конспект, книги КПКМ и МТП, а также ряд других материалов (включая методички и видеозаписи) доступны на авторском сайте по адресу <https://mgivanov.ru>.



Призываю читателей присыпать найденные конспекте опечатки и ляпы (особенно в формулах!). Опечатки, присланные студентами слушающими курс, учитываются при выставлении оценки за работу в семестре.

За присланные опечатки выражаю благодарность В.А. Дудченко, А.А. Пластиину, В.Е. Тяжелкову.

В конспекте используются следующие обозначения:

(л) — ликбезовский материал напоминает необходимые разделы математики в контексте данного курса³;

¹КПКМ оказалась книгой не столько для студентов, сколько для преподавателей квантовой механики, поэтому для первого семестра пришлось делать комментированную программу с указанием какие параграфы КПКМ по какой теме рекомендуется читать, причём порядок чтения оказался не всегда линейным.

²Другие книги также могут быть полезны, но для автора удобнее ссылаться на свои книги, что позволяет добиться лучшего единства изложения (в том числе единства обозначений и соглашений).

³Как обычно в теоретической физике, математика излагается «на физическом уровне строгости», т. е. все условия, которые требуются для применения используемых операций, предполагаются выполненными. Таким образом, знакомство с тем или иным математическим формализмом по данному пособию не заменяет изучения соответствующих разделов математики по учебникам, излагающим материал на математическом уровне строгости, со всеми необходимыми оговорками в определениях и формулировках теорем, со строгими доказательствами. В данном пособии математически строгое изложение всего материала не является возможным как по причине ограниченности объема, так и потому, что основной целью пособия

(Φ) — обсуждение физического смысла;

(Π) — обсуждение приложений вне квантовой механики;

* — материал для углубленного изучения;

** — факультативный материал;

*** — факультативный материал повышенной сложности;

(\sim) — предварительные нестрогие соображения, полезные для понимания.

Метки типа ($\sim /$) ($/ \sim$), подобно скобкам, обрамляют фрагмент текста, помеченный символом \sim .

Аналогичные «скобки» могут использоваться для других меток.

является обучение применению соответствующих методов к решению физических задач. Тем не менее и не до конца строгое изложение является полезным не только как шпаргалка-приложение к задачнику. При математически строгом изложении часто опускаются нестрогие наводящие соображения, благодаря которым соответствующие разделы математики могли быть созданы, в данном пособии такие соображения по возможности проговариваются явно.

Глава 0

Геометрическая прогрессия (л)

На протяжении второго семестра квантовой механики нам снова и снова будут встречаться геометрические прогрессии и похожие на них ряды, но знаменателями этих прогрессий обычно будут не числа, а операторы. В связи с этим полезно вспомнить и систематизировать соответствующий материал из математического анализа в соответствующем контексте.

Основная цель данной главы — показать как возникают асимптотические ряды, которые сначала ведут себя почти как сходящиеся и позволяют получить разумное приближение к ответу, а потом всё-таки расходятся.

0.1 Геометрическая прогрессия с комплексным знаменателем

Рассмотрим сумму геометрической прогрессии

$$S(q) := \sum_{k=0}^{\infty} q^k = 1 + q + q^2 + \cdots + q^n + \cdots = 1 + q (1 + q + q^2 + \cdots + q^n + \cdots) = 1 + q S(q). \quad (1)$$

Отсюда можно найти хорошо знакомую школьную формулу суммы геометрической прогрессии

$$S(q) = \frac{1}{1 - q}. \quad (2)$$

Если сумма (1) определена, то эта формула должна работать.

Для комплексного q условия сходимости определяются

$$S(q) = \begin{cases} \frac{1}{1-q}, & |q| < 1, \\ \infty, & |q| > 1 \text{ или } q = 1, \\ \text{не существует,} & |q| = 1, q \neq 1; \end{cases} \quad q \in \mathbb{C}. \quad (3)$$

- $|q| < 1$ — (в случае общего положения) ломаная линия вписанная в скручивающуюся логарифмическую спираль сходится к точке,
- $|q| > 1$ — (в случае общего положения) ломаная линия вписанная в раскручивающуюся логарифмическую спираль стремится к бесконечности,
- $|q| = 1, q \neq 1$ — ломанная линия вписанная в окружность не имеет предела,
- $q = 1$ — ломанная с единичными звеньями вытянутая вдоль прямой стремится к бесконечности.

Мы можем посмотреть на формулу (2) и с другой стороны: геометрическая прогрессия — это ряд Тейлора для функции

$$f(q) = \frac{1}{1 - q},$$

$$\text{ряд_Тейлора}[f(q)] = 1 + q + q^2 + \cdots + q^n + \cdots = S(q). \quad (4)$$

Ряд Тейлора имеет единичный радиус сходимости, но формальный ряд можно написать при любом q . И при любом q данному ряду соответствует функция $f(q)$, которую можно восстановить с помощью аналитического продолжения из единичного диска, где ряд сходится, на всю комплексную плоскость кроме $q = 1$. Это позволяет использовать формулу (2) и в тех случаях, когда ряд не сходится.

Но приближать функцию $f(q)$ с помощью ряда Тейлора можно только при $|q| < 1$, а если $|q| \ll 1$, то для практических вычислений из ряда Тейлора достаточно взять несколько первых членов (часто достаточно взять $f(q) \approx 1 + q$).

0.2 Норма оператора

Для операторов мы также можем определить геометрическую прогрессию (1), просто надев шляпку на знаменатель:

$$S(\hat{q}) := \sum_{k=0}^{\infty} \hat{q}^k = \hat{1} + \hat{q} + \hat{q}^2 + \cdots + \hat{q}^n + \cdots = \hat{1} + \hat{q} (\hat{1} + \hat{q} + \hat{q}^2 + \cdots + \hat{q}^n + \cdots) = \hat{1} + \hat{q} S(\hat{q}). \quad (5)$$

Вопрос о сходимости для операторной геометрической прогрессии оказывается тоньше.

Аналогом модуля числа для оператора служит его норма¹:

$$\|\hat{q}\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|\hat{q}\psi\|}{\|\psi\|}, \quad \|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (6)$$

Если для оператора существует базис собственных векторов², то норма определяется максимальным модулем собственного числа оператора:

$$\|\hat{N}\| = \sup |\lambda|, \quad [\hat{N}, \hat{N}^\dagger] = 0, \quad \hat{N}\psi = \lambda\psi. \quad (7)$$

В квантовой механике знаменатель операторной геометрической прогрессии часто будет нормальным оператором.

Условие сходимости ряда — $\|\hat{q}\| < 1$, получаем обобщение формулы (3):

$$S(\hat{q}) = \begin{cases} (1 - \hat{q})^{-1}, & \|\hat{q}\| < 1, \\ \text{ряд расходится,} & \|\hat{q}\| \geq 1. \end{cases} \quad (8)$$

Вроде бы задача решена, но в квантовой механике операторы наблюдаемых величин часто неограничены, т. е. имеют бесконечную норму. Так обычно не ограничен сверху спектр гамильтониана (есть сколь угодно высокие уровни энергии). Неограничены операторы импульса, координаты, орбитального момента импульса и многие другие³.

Так что в физике часто бывает ситуация, когда ряд расходится, но считать всё равно надо. И тут помогает уточнение области определения отдельных членов ряда и суммы ряда.

0.3 Область определения оператора

(*) Для неограниченного оператора область определения не совпадает с гильбертовым пространством, поскольку всегда найдётся вектор с конечной нормой, который после действия неограниченного оператора приобретёт бесконечную норму. Такой вектор в область определения не включается.

Если неограниченный оператор является нормальным, то его область определения плотна в гильбертовом пространстве. Если оператор имеет физический смысл, то физики обычно о его области определения просто не задумываются (пока не наткнутся на противоречие в вычислениях).(*)

Для каждого собственного вектора ψ_λ нормального оператора \hat{N} операторная геометрическая прогрессия сводится к геометрической прогрессии от собственного числа.

$$\hat{N}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda \Rightarrow S(\hat{N})\psi_\lambda = (\hat{1} + \hat{N} + \hat{N}^2 + \cdots + \hat{N}^n + \cdots)\psi_\lambda = (1 + \lambda + \lambda^2 + \cdots + \lambda^n + \cdots)\psi_\lambda = S(\lambda)\psi_\lambda.$$

Для суммы числовых геометрических прогрессий $S(\lambda)$ мы имеем обычные условия сходимости (3). Так что даже если оператор \hat{N} неограничен, на собственных векторах для которых $|\lambda| < 1$ оператор $S(\hat{N})$ оказывается определён.

Таким образом, мы нашли область определения оператора $S(\hat{N})$ — это подпространство $\mathcal{H}_{S(\hat{N})}$ натянутое на собственные векторы для которых $|\lambda| < 1$.

На подпространстве $\mathcal{H}_{S(\hat{N})}$, натянутом на собственные векторы, для которых $|\lambda| \geq 1$ оператор $S(\hat{N})$ не определён, но области определения частичных сумм геометрической прогрессии плотны в $\mathcal{H}_{S(\hat{N})}$.

¹В математике принято считать, что норма должна быть конечной, а если выражение (6) даёт бесконечность, то норма не определена. Мы будем считать, что в этом случае норма принимает значение $+\infty$. Мы также будем рассматривать только такие гильбертовы пространства, в которых имеются ненулевые векторы (то есть не рассматриваем случай, когда всё пространство состоит из одного нулевого вектора).

²Такие операторы называют *нормальными*. Для нормального оператора \hat{N} выполняется условие $[\hat{N}, \hat{N}^\dagger] = 0$. Унитарные и самосопряжённые операторы относятся к нормальным.

³Зато все унитарные операторы ограничены и для них всегда $\|\hat{U}\| = 1$. Поэтому математики, занимающиеся квантовой механикой, любят переводить соотношения с языка самосопряжённых операторов на язык унитарных операторов.

0.4 Асимптотические ряды

Любой вектор $\psi \in \mathcal{H}$ может быть разложен на два ортогональных слагаемых, лежащих в $\mathcal{H}_{S(N)}$ и $\mathcal{H}_{\mathcal{S}(N)}$ соответственно:

$$\psi = \psi_{S(N)} + \psi_{\mathcal{S}(N)}. \quad (9)$$

Пусть на вектор ψ действует оператор частичной суммы геометрической прогрессии

$$S_K(\hat{N}) := \sum_{k=0}^K \hat{N}^k. \quad (10)$$

$$S_K(\hat{N})\psi = S_k(\hat{N})\psi_{S(N)} + S_k(\hat{N})\psi_{\mathcal{S}(N)}. \quad (11)$$

При $K \rightarrow \infty$ первое слагаемое сходится:

$$S_K(\hat{N})\psi_{S(N)} \rightarrow S(\hat{N})\psi_{S(N)}, \quad K \rightarrow \infty,$$

а второе — расходится:

$$S_K(\hat{N})\psi_{\mathcal{S}(N)} \rightarrow \infty, \quad K \rightarrow \infty.$$

В задачах квантовой механики мы будем иметь дело с действием операторных геометрических прогрессий на векторы, которые почти попадают в пространство $\mathcal{H}_{S(N)}$, т. е. с ситуацией когда

$$\psi = \psi_{S(N)} + \psi_{\mathcal{S}(N)}, \quad \|\psi_{S(N)}\| \gg \|\psi_{\mathcal{S}(N)}\|. \quad (12)$$

В этом случае ряд (11), конечно, расходится, поскольку даже малая добавка $\psi_{\mathcal{S}(N)}$ под действием оператора $S_K(\hat{N})$ мере роста K будет неограниченно расти, но для не слишком больших K эта добавка будет ещё мала. В таком случае приближённое равенство

$$(\hat{1} - \hat{N})^{-1}\psi \approx S_K(\hat{N})\psi = \sum_{k=0}^K (\hat{N}^k \psi) \quad (13)$$

по мере роста K сначала будет выполняться всё лучше и лучше (пока расходящееся слагаемое мало по сравнению с $\|\{S(\hat{N}) - S_K(\hat{N})\}\psi\|$), но начиная с какого-то момента по мере роста K точность приближения (13) начнёт ухудшаться.

Ряд в правой части (13) обычно не сходящийся а *асимптотический*. Мы не будем подробно обсуждать свойства таких рядов (и даже аккуратно определять их), отметим только, что *асимптотический ряд расходится, но первые несколько слагаемых могут давать хорошее приближение* для искомой функции.

(!) Для того, чтобы оператор $(1 - \hat{N})^{-1}$ был определён, не нужно, чтобы ряд сходился, достаточно, чтобы среди собственных чисел оператора \hat{N} не было единиц. Так что для любых собственных чисел $\lambda \neq 1$ геометрической прогрессии можно приписать предел:

$$\frac{1}{1 - \lambda} = \text{аналитическое_продолжение}[S(\lambda)],$$

аналогично (поточечно), в подпространстве, соответствующим неединичным собственным числам

$$\frac{1}{1 - \hat{N}} = \text{аналитическое_продолжение}[S(\hat{N})].$$

(*) Если есть возможность спроектировать функции на $\mathcal{H}_{S(N)}$, то ряд станет сходящимся, но предел не будет точным ответом: нам нужна функция $(1 - \hat{N})^{-1}\psi$, а выполнив проекцию мы получим

$$(1 - \hat{N})^{-1}\psi_{S(N)} = \lim_{K \rightarrow \infty} S_K(\hat{N})\psi_{S(N)}.$$

Мы ошибёмся на

$$(1 - \hat{N})^{-1}\psi_{\mathcal{S}(N)}.$$

Последняя оценка следует из линейности оператора.

Глава 1

Стационарная теория возмущений

Для типичного гамильтониана \hat{H} стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi_a = E_a\psi_a, \quad a \text{ — номер уровня} \quad (1.1)$$

не решается аналитически. Поэтому нам нужны приближённые методы, к числу которых относится *стационарная теория возмущений*.

Пусть нам повезло и гамильтониан \hat{H} можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (1.2)$$

где \hat{H}_0 — «хороший» *невозмущённый гамильтониан*, для которого мы умеем решать стационарное уравнение Шрёдингера, а \hat{V} — малая поправка (*возмущение*).

(!) Разложение (1.2) гамильтониана \hat{H} на невозмущённый гамильтониан \hat{H}_0 и возмущение \hat{V} — вопрос удобства решения уравнения Шрёдингера, поэтому такое разложения определено не однозначно.

Мы будем искать решение для стационарного уравнения Шрёдингера (1.1) методом последовательных приближений, начиная с решения стационарного уравнения Шрёдингера для невозмущённого гамильтониана:

$$\hat{H}_0\psi_a^{(0)} = E_a^{(0)}\psi_a^{(0)}. \quad (1.3)$$

(п) Теория возмущений, в том виде в котором мы её строим применима не только в квантовой механике. Приближённое решения спектральной задачи для эрмитового оператора или матрицы полезно для классических задач математической физики (теплопроводность, колебания и волны и т. п.) и для численного решения дифференциальных уравнений (обыкновенных и в частных производных).

1.1 Постановка задачи

Перепишем разложение (1.2) гамильтониана \hat{H} на невозмущённый гамильтониан \hat{H}_0 и возмущение \hat{V} добавив перед \hat{V} малый вещественный множитель ε :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V}. \quad (1.4)$$

Мы всегда можем вернуться от разложения (1.4) к разложению (1.2) положив $\varepsilon = 1$, но новое разложение (1.4) удобнее тем, что в нём присутствует *числовой* малый параметр ε . Это позволит нам (хотя бы в начале) не разбираться что значит малость оператора \hat{V} , а просто устремить $\varepsilon \rightarrow 0$. Кроме того, разложение по степеням ε позволяет легко контролировать степень малости разных членов в рассматриваемых уравнениях.

Мы будем искать решение уравнения Шрёдингера (1.1) в виде степенных рядов по ε :

$$E_a = E_a^0 + \varepsilon E_a^{(1)} + \varepsilon^2 E_a^{(2)} + \dots, \quad (1.5)$$

$$\psi_a = \psi_a^0 + \varepsilon \psi_a^{(1)} + \varepsilon^2 \psi_a^{(2)} + \dots \quad (1.6)$$

(!) Это автоматически означает, что уровни энергии гамильтонианов \hat{H} и \hat{H}_0 могут быть пронумерованы одинаковым образом. Дальше мы увидим, что порядок уровней не должен меняться.

Подставим разложения (1.4), (1.5), (1.6) в уравнение Шрёдингера (1.1):

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon\hat{V})(\psi_a^0 + \varepsilon\psi_a^{(1)} + \varepsilon^2\psi_a^{(2)} + \dots) = (E_a^0 + \varepsilon E_a^{(1)} + \varepsilon^2 E_a^{(2)} + \dots)(\psi_a^0 + \varepsilon\psi_a^{(1)} + \varepsilon^2\psi_a^{(2)} + \dots). \quad (1.7)$$

Раскрыв скобки мы можем приравнять друг другу члены с определёнными степенями ε , начиная с ε^0 :

$$\hat{H}_0\psi_a^{(0)} = E_a^{(0)}\psi_a^{(0)}, \quad (1.8)$$

$$\hat{H}_0\psi_a^{(1)} + \hat{V}\psi_a^{(0)} = E_a^{(0)}\psi_a^{(1)} + E_a^{(1)}\psi_a^{(0)}, \quad (1.9)$$

$$\hat{H}_0\psi_a^{(2)} + \hat{V}\psi_a^{(1)} = E_a^{(0)}\psi_a^{(2)} + E_a^{(1)}\psi_a^{(1)} + E_a^{(2)}\psi_a^{(0)}, \quad (1.10)$$

... ...

$$\hat{H}_0\psi_a^{(n)} + \hat{V}\psi_a^{(n-1)} = \sum_{k=0}^n E_a^{(k)}\psi_a^{(n-k)}. \quad (1.11)$$

(*) После получения системы (1.8), (1.9), (1.10), (1.11) параметр ε нам больше не нужен и мы можем положить его равным единице.

Уравнение нулевого порядка теории возмущений (1.8) совпало с невозмущённым уравнением Шрёдингера (1.3). Предполагается, что это уравнение уже решено. Далее мы последовательно решаем уравнения (1.9), (1.10), (1.11) до тех пор, пока не достигнем нужной нам точности.

Во многих задачах (в частности почти во всех учебных задачах) можно ограничиться первым нетриалиальным порядком разложения, т. е. первым порядком в котором к решению невозмущённого уравнения Шрёдингера возникает ненулевая поправка. Обычно хватает первой или второй поправки для энергий и первой поправки для волновых функций.

(!*) Ряды теории возмущений (1.5), (1.6) часто (как правило) расходятся! Тем не менее, первые несколько порядков теории возмущений обычно дают хорошее приближение к точному решению (см. главу 0 «Геометрическая прогрессия»).

(!) Уравнения (1.9), (1.10), (1.11) можно решать в любом базисе. Иногда их удобно решать как дифференциальные уравнения в координатном базисе. Стандартный подход состоит в том, чтобы решать уравнения в базисе стационарных состояний невозмущённого гамильтониана.

1.2 Невырожденный спектр

Пусть гамильтонианы \hat{H} и \hat{H}_0 имеют только невырожденный дискретный спектр.

Скалярно умножим уравнения (1.9), (1.10), (1.11) на невозмущённое стационарное состояние $\psi_b^{(0)}$.

$$\langle \psi_b^{(0)} | \hat{H}_0 | \psi_a^{(1)} \rangle + \langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(0)} \rangle = E_a^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle + E_a^{(1)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(0)} \rangle, \quad (1.12)$$

$$\langle \psi_b^{(0)} | \hat{H}_0 | \psi_a^{(2)} \rangle + \langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle = E_a^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(2)} \rangle + E_a^{(1)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle + E_a^{(2)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(0)} \rangle, \quad (1.13)$$

... ...

$$\langle \psi_b^{(0)} | \hat{H}_0 | \psi_a^{(n)} \rangle + \langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(n-1)} \rangle = \sum_{k=0}^n E_a^{(k)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n-k)} \rangle. \quad (1.14)$$

Используем соотношения

$$\langle \psi_b^{(0)} | \hat{H}_0 = \langle \psi_b^{(0)} | E_b^{(0)}, \quad \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(0)} \rangle = \delta_{ba}$$

и введём обозначение

$$V_{ba} = \langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(0)} \rangle.$$

Получаем

$$E_b^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle + V_{ba} = E_a^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle + E_a^{(1)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(0)} \rangle, \quad (1.15)$$

$$E_b^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(2)} \rangle + \langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle = E_a^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(2)} \rangle + E_a^{(1)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle + E_a^{(2)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(0)} \rangle, \quad (1.16)$$

... ...

$$E_b^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n)} \rangle + \langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(n-1)} \rangle = \sum_{k=0}^n E_a^{(k)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n-k)} \rangle. \quad (1.17)$$

Рассмотрим диагональные члены, для которых $a = b$. Первый слагаемые в левой и правой частях каждого уравнения сократятся, в последних слагаемых в правой части скалярное произведение обращается в единицу:

$$V_{aa} = E_a^{(1)}, \quad (1.18)$$

$$\langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle = E_a^{(1)} \langle \psi_a^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle + E_a^{(2)}, \quad (1.19)$$

... ...

$$\langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(n-1)} \rangle = \sum_{k=1}^{n-1} E_a^{(k)} \langle \psi_a^{(0)} | \psi_a^{(n-k)} \rangle + E_a^{(n)}. \quad (1.20)$$

Мы получили первую поправку к энергии $E_a^{(0)}$ в явном виде, а для следующих поправок к энергии нам нужны все предыдущие поправки к энергии и проекции разложения всех предыдущих поправок к волновой функции на невозмущённое состояние:

$$E_a^{(1)} = V_{aa}, \quad (1.21)$$

$$E_a^{(2)} = \langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} - E_a^{(1)} | \psi_a^{(1)} \rangle, \quad (1.22)$$

...

$$E_a^{(n)} = \langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} - E_a^{(1)} | \psi_a^{(n-1)} \rangle - \sum_{k=2}^{n-1} E_a^{(k)} \langle \psi_a^{(0)} | \psi_a^{(n-k)} \rangle. \quad (1.23)$$

Рассмотрим недиагональные члены, для которых $a \neq b$. Первое слагаемые из левой части каждого уравнения перенесём вправо и скомбинирует с первым слагаемым в правой части, в последних слагаемых в правой части скалярное произведение обращается в нуль:

$$V_{ba} = (E_a^{(0)} - E_b^{(0)}) \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle, \quad (1.24)$$

$$\langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle = (E_a^{(0)} - E_b^{(0)}) \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(2)} \rangle + E_a^{(1)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle, \quad (1.25)$$

...

$$\langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(n-1)} \rangle = (E_a^{(0)} - E_b^{(0)}) \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n)} \rangle + \sum_{k=1}^{n-1} E_a^{(k)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n-k)} \rangle. \quad (1.26)$$

Отсюда получаем недиагональные коэффициенты разложения n -й поправки к волновой функции по невозмущённым состояниям:

$$\langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle = \frac{V_{ba}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}, \quad (1.27)$$

$$\langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(2)} \rangle = \frac{\langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} - \frac{E_a^{(1)}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle, \quad (1.28)$$

...

$$\langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n)} \rangle = \frac{\langle \psi_b^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(n-1)} \rangle}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{E_a^{(k)}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(n-k)} \rangle. \quad (1.29)$$

(!!!) Мы видим, что даже в первом порядке теории возмущений мы можем найти только недиагональные ($a \neq b$) коэффициенты разложения. Это связано с тем, что мы фиксировали нормировку невозмущённых волновых функций $\psi_a^{(0)}$, а нормировка возмущённых волновых функций до сих пор осталась произвольной. Мы можем выбирать все скалярные произведения, которые не можем вычислить произвольно, для максимального упрощения уравнений (1.21), (1.22), (1.23), (1.27), (1.28), (1.29) положим

$$\langle \psi_a^0 | \psi_a^{(n)} \rangle = 0 \quad (1.30)$$

Уравнения (1.21), (1.22), (1.23) теперь переписываются в следующем простом виде

$$E_a^{(1)} = V_{aa}, \quad (1.31)$$

$$E_a^{(2)} = \langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle, \quad (1.32)$$

...

$$E_a^{(n)} = \langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(n-1)} \rangle. \quad (1.33)$$

Получившуюся систему можно последовательно решать

$$E_a^{(1)} = V_{aa}, \quad (1.34)$$

$$\psi_a^{(1)} = \sum_{b \neq a} \psi_b^{(0)} \langle \psi_b^{(0)} | \psi_a^{(1)} \rangle = \sum_{b \neq a} \psi_b^{(0)} \frac{V_{ba}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}, \quad (1.35)$$

$$E_a^{(2)} = \langle \psi_a^{(0)} | \hat{V} | \psi_a^{(1)} \rangle = \sum_{b \neq a} V_{ab} \frac{V_{ba}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}, \quad (1.36)$$

$$\psi_a^{(2)} = \sum_{b,c \neq a} \psi_b^{(0)} \left(\frac{V_{bc} V_{ca}}{(E_a^{(0)} - E_b^{(0)})(E_a^{(0)} - E_c^{(0)})} - \frac{V_{ba} V_{aa}}{(E_a^{(0)} - E_b^{(0)})^2} \right), \quad (1.37)$$

В большинстве задач нам достаточно первых двух поправок к энергии (1.34), (1.36) и первой поправки к волновой функции (1.35).

Волновая функция, вычисленная с точностью до первого порядка теории возмущений имеет скалярный квадрат, отличающийся от 1 на член второго порядка малости:

$$\langle \psi_a^{(0)} + \varepsilon \psi_a^{(1)} | \psi_a^{(0)} + \varepsilon \psi_a^{(1)} \rangle = 1 + \varepsilon^2 \sum_{b \neq a} \left| \frac{V_{ba}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} \right|^2. \quad (1.38)$$

Таким образом, волновая функция в первом порядке теории возмущений оказывается нормированной с точностью до второго порядка¹. Работая в первом порядке теории возмущений перенормировать её на единицу было бы превышением точности.

Рассматривая полученный ответ мы видим, каково условие малости возмущения, т. е. каково условие применимости теории возмущений:

$$|V_{ab}| \ll |E_a^{(0)} - E_b^{(0)}|. \quad (1.39)$$

Матричный элемент возмущения между двумя невозмущёнными состояниями должен быть мал по сравнению с разностью энергий этих состояний.

(*) Если гамильтонианы кроме дискретного спектра имеют непрерывный, то в формулах для поправок к дискретным уровням энергии суммы по дискретному спектру следует дополнить интегралами по непрерывному, например

$$\psi_a^{(1)} = \sum_{b \neq a} \frac{\psi_b^{(0)} V_{ba}}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} + \int \frac{\psi_b^{(0)} V_{ba} db}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}, \quad E_a^{(2)} = \sum_{b \neq a} \frac{|V_{ba}|^2}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} + \int \frac{|V_{ba}|^2 db}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}.$$

(**) При внимательном рассмотрении мы видим, что вклад диагональных матричных элементов возмущения — это ещё не совсем настоящая теория возмущений. Введём оператор диагональной части возмущения

$$\hat{V}_{\text{diag}} = \sum_a |\psi_a^{(0)}\rangle V_{aa} \langle \psi_a^{(0)}|. \quad (1.40)$$

Мы можем переписать исходный гамильтониан \hat{H} (1.2) в следующем виде

$$\hat{H} = (\hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{diag}}) + (\hat{V} - \hat{V}_{\text{diag}}). \quad (1.41)$$

В качестве нового невозмущённого гамильтониана возьмём $\hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{diag}}$, а в качестве нового возмущения — недиагональную часть прежнего $\hat{V} - \hat{V}_{\text{diag}}$. Новые невозмущённые состояния по-прежнему $\psi_a^{(0)}$, новые невозмущённые уровни энергии $E_a^{(0)} + V_{aa}$ включают прежнюю первую поправку.

1.3 Вырожденный спектр

Пусть спектр невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 вырожден, т. е. существуют линейно независимые состояния с $\psi_{ai}^{(0)}$ одинаковой энергией $E_a^{(0)}$.

Индексы a, b нумеруют теперь уровни энергии, а индексы i, j различают базисные состояния с одинаковой невозмущённой энергией. По сравнению с параграфом 1.2 «Невырожденный спектр» индексы a, b заменяются на пары индексов ai, bj и т.д.

$$\langle \psi_{ai}^{(0)} | \psi_{bj}^{(0)} \rangle = \delta_{ab} \delta_{ij}.$$

Нас будут интересовать подпространство \mathcal{H}_a пространства состояний \mathcal{H} , отвечающее определённому значению энергии для невозмущённого гамильтониана, т. е. определённому значению $E_a^{(0)}$. Индекс a фиксирован, а индекс i нумерует базисные векторы $\psi_{ai}^{(0)}$ в подпространстве \mathcal{H}_a .

Полезно ввести ортогональный проектор на подпространство \mathcal{H}_a

$$\hat{P}_a = \sum_i |\psi_{ai}^{(0)}\rangle \langle \psi_{ai}^{(0)}|. \quad (1.42)$$

На подпространстве \mathcal{H}_a оператор \hat{P}_a действует как единичный оператор $\hat{1}_a$, а на ортогональных к нему векторах — как нулевой:

$$\hat{P}_a^2 = \hat{P}_a, \quad \hat{P}_a |\psi_{bj}^{(0)}\rangle = \delta_{ab} |\psi_{bj}^{(0)}\rangle.$$

¹Вы можете считать степени ε , или, если вы положили $\varepsilon = 1$, степени матричных элементов возмущения V_{cd}

Если ограничить оператор \hat{H}_0 на подпространство \mathcal{H}_a , то он будет пропорционален проектору \hat{P}_a

$$\hat{H}_{0a} = \hat{P}_a \hat{H}_0 \hat{P}_a = E_a^{(0)} \hat{P}_a. \quad (1.43)$$

На подпространстве \mathcal{H}_a оператор \hat{H}_{0a} пропорционален единичному оператору $\hat{1}_a$, так что \hat{H}_{0a} коммутирует со всеми операторами на этом подпространстве и диагонален при любом выборе базиса в \mathcal{H}_a .

Ненулевые недиагональные матричные элементы возмущения $V_{ai;aj}$ в подпространстве \mathcal{H}_a нарушают условие применимости теории возмущений (1.39).

Ненулевые диагональные матричные элементы возмущения $V_{ai;ai}$ условие применимости теории возмущений (1.39) не нарушает, это можно увидеть вернувшись к выкладкам в параграфе 1.2 «Невырожденный спектр», либо перекинув вклад диагональных матричных элементов \hat{V} из возмущения в невозмущённый гамильтониан, как мы делали выше (1.40), (1.41).

Матрица (или оператор)

$$\hat{V}_a = \hat{P}_a \hat{V} \hat{P}_a \quad (1.44)$$

с компонентами $V_{ai;aj}$ — это ограничение оператора \hat{V} на подпространство \mathcal{H}_a .

Оператор \hat{V}_a также эрмитов (как на всём пространстве \mathcal{H} , так и на подпространстве \mathcal{H}_a) и его можно диагонализовать выбором базиса в \mathcal{H}_a . Оператор \hat{H}_{0a} (1.43) при этом остаётся диагональным.

Если подпространство \mathcal{H}_a конечномерно (очень частый случай в задачах), то диагонализация оператора \hat{V}_a сводится к диагонализации конечномерной эрмитовой матрицы с компонентами $V_{ai;aj}$. После диагонализации диагональные матричные элементы \hat{V}_a могут быть найдены как собственные числа из *векового уравнения*

$$\det_{\mathcal{H}_a}(\hat{V}_a - E^{(1)} \hat{1}_a) = 0 \Leftrightarrow \det(V_{ai;aj} - E_a^{(1)} \delta_{ij}) = 0. \quad (1.45)$$

Новые базисные состояния $\psi_{aK}^{(0)}$ диагонализуют одновременно \hat{H}_0 и \hat{V}_a :

$$\psi_{aK}^{(0)} = \sum_i C_{Ki}^a \psi_{ai}^{(0)}, \quad \hat{V}_a \psi_{aK}^{(0)} = E_{aK}^{(1)} \psi_{aK}^{(0)}, \quad (1.46)$$

$$\sum_j V_{ai;aj} C_{Kj}^a = E_{aK}^{(1)} C_{Ki}^a \Leftrightarrow \sum_j (V_{ai;aj} - E_{aK}^{(1)} \delta_{ij}) C_{Kj}^a = 0.$$

(О) Базисные функции $\psi_{aK}^{(0)}$ называют *правильными волновыми функциями нулевого приближения*.

Если мы перешли к правильным волновым функциям нулевого приближения для всех a , то тем самым мы одновременно диагонализовали оператор \hat{H}_0 и все операторы \hat{V}_a . Мы можем ввести оператор

$$\hat{V}_{\text{diag.}} = \sum_a \hat{V}_a = \sum_a \hat{P}_a \hat{V} \hat{P}_a. \quad (1.47)$$

Оператор $\hat{V}_{\text{diag.}}$ коммутирует с \hat{H}_0 и диагонализируется при одновременной диагонализации всех операторов \hat{V}_a .

(!) В исходном пространстве \mathcal{H} операторы — большие (возможно бесконечные) матрицы с компонентами вида $V_{ai;bj}$. Эти матрицы можно считать блочными: индексы a, b нумеруют блоки, а индексы i, j — матричные элементы внутри блоков. Оператору \hat{V}_a соответствует один диагональный блок. Оператор $\hat{V}_{\text{diag.}}$ — блочно диагональная матрица, образованная всеми диагональными блоками блочной матрицы \hat{V} .

1.3.1 Почти вырожденные уровни*

Если невозмущённый гамильтониан

$$\hat{H}_0 = \sum_a |\psi_a^{(0)}\rangle E_a \langle \psi_a^{(0)}|$$

содержит несколько близких уровней $c, d \in D$, для которых нарушается условие применимости теории возмущений (1.39)

$$|V_{cd}| \ll |E_c^{(0)} - E_d^{(0)}|,$$

то мы можем модифицировать невозмущённый гамильтониан так, чтобы проблемные уровни стали вырожденными

$$\hat{H}'_0 = \sum_{a \notin D} |\psi_a^{(0)}\rangle E_a \langle \psi_a^{(0)}| + E_D^{(0)} \sum_{c \in D} |\psi_c^{(0)}\rangle \langle \psi_c^{(0)}|,$$

а разницу старого и нового невозмущённого гамильтонианов прибавить к возмущению

$$\hat{V}' = \hat{V} + \sum_{c \in D} |\psi_c^{(0)}\rangle (E_c^{(0)} - E_D^{(0)}) \langle \psi_c^{(0)}|.$$

После этого для невозмущённого гамильтониана \hat{H}'_0 с возмущением \hat{V}' мы можем искать правильные волновые функции нулевого приближения, как это описано выше.

1.4 Оператор Грина в дискретном спектре*

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для состояния дискретного спектра возмущённого гамильтониана:

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V})\psi_E = E\psi_E, \quad E = E^{(0)} + \delta E. \quad (1.48)$$

Перепишем уравнение (1.48) вынеся возмущение в правую часть, которую рассмотрим как неоднородность

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})\psi_E = \underbrace{(\delta E - \varepsilon \hat{V})\psi_E}_{\text{рассмотрим как неоднородность}}. \quad (1.49)$$

Видно, что по построению наша «неоднородность» ортогональна $\psi^{(0)}$

$$\underbrace{\langle \psi^{(0)} | (\hat{H}_0 - E^{(0)}) | \psi_E \rangle}_0 = \langle \psi^{(0)} | \underbrace{(\delta E - \varepsilon \hat{V})}_{\text{неоднородность}} | \psi_E \rangle. \quad (1.50)$$

Общее решение неоднородного линейного уравнения может быть представлено как сумма частного решения неоднородного уравнения и общего решения однородного уравнения. В нашем случае

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})\psi^{(0)} = 0 \text{ — однородное уравнение}$$

совпадает с невозмущённым уравнением Шрёдингера. Обозначим $\hat{P}_{(0)}$ — ортогональные проекторы на пространство \mathcal{H}_0 решений этого уравнения.

Частное решение неоднородного уравнения можно сначала найти для некоторых базисных неоднородностей (дельта-функций или фурье-гармоник), а потом разлагая по этому базису произвольные неоднородности линейно по неоднородности, т. е. может быть получено из неоднородности действием некоторого линейного оператора (*оператора Грина*), который обозначим $\hat{G}_0(E^{(0)})$. Тогда мы получаем

$$\psi_E = \psi^{(0)} + \hat{G}_0(E^{(0)})(\delta E - \varepsilon \hat{V})\psi_E. \quad (1.51)$$

На самом деле это исходное уравнение (1.48), переписанное в другом виде. Например, если исходное уравнение было дифференциальным, а оператор Грина записан как интегральный оператор², то новое уравнение — интегральное.

Если подействовать на это уравнение слева оператором $(\hat{H}_0 - E^{(0)})$, используя (1.49) мы получаем

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)})\psi_E = \underbrace{(\hat{H}_0 - E^{(0)})\psi^{(0)}}_0 + (\hat{H}_0 - E^{(0)})\hat{G}_0(E^{(0)})\underbrace{(\delta E - \varepsilon \hat{V})\psi_E}_{\perp \psi^{(0)}} = (\delta E - \varepsilon \hat{V})\psi_E.$$

Таким образом, оператор $(\hat{H}_0 - E^{(0)})\hat{G}_0(E^{(0)})$ должен действовать как единичный оператор на подпространстве, ортогональном $\psi^{(0)}$. Удобно выбрать оператор Грина в виде следующего самосопряжённого оператора:

$$\hat{G}_0(E^{(0)}) = (\hat{1} - \hat{P}_{(0)})(\hat{H}_0 - E^{(0)})^{-1}(\hat{1} - \hat{P}_{(0)}) = \begin{cases} (\hat{H}_0 - E^{(0)})^{-1} & \text{на векторах } \perp \mathcal{H}_0, \\ 0 & \text{на векторах из } \mathcal{H}_0 \end{cases}. \quad (1.52)$$

Далее мы будем символически писать

$$\hat{G}_0(E^{(0)}) = (\hat{H}_0 - E^{(0)})^{-1},$$

имея в виду что оператор $(\hat{H}_0 - E^{(0)})^{-1}$ продолжен нулем на подпространство \mathcal{H}_0 , на котором он не определён (1.52), т. е. по определению

$$\hat{G}_0(E^{(0)})\psi^{(0)} = (\hat{H}_0 - E^{(0)})^{-1}\psi^{(0)} = 0.$$

1.5 Теория возмущений через оператор Грина*

Вернёмся к уравнению (1.51) и введём сокращённое обозначение $\hat{G}_0(E^{(0)}) = \hat{G}_0$

$$\psi_E = \psi^{(0)} + \hat{G}_0 \underbrace{(\delta E - \varepsilon \hat{V})}_{\sim \varepsilon} \psi_E. \quad (1.53)$$

²

$$\hat{G}_0(E^{(0)})\psi(x) = \int G_0(E^{(0)}, x, y) \psi(y) dy.$$

Функция $G_0(E^{(0)}; x, y)$ называется *функцией Грина*.

Второй член в правой части малая (порядка ε) поправка. Это позволяет решать уравнение методом последовательных приближений.

Для ψ_E возьмём в качестве нормировочного условия равенство единицы проекции на $\psi^{(0)}$ (см. (1.30)):

$$\langle \psi^{(0)} | \psi_E \rangle = 1. \quad (1.54)$$

И отметим особо свойство (1.50) из которого с учётом (1.54) сразу выражается поправка к энергии:

$$\langle \psi^{(0)} | (\delta E - \varepsilon \hat{V}) | \psi_E \rangle = 0 \Rightarrow \delta E = \varepsilon \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi_E \rangle. \quad (1.55)$$

Считаем, что поправки к энергии и волновой функции разлагаются в ряд по ε :

$$\delta E = \varepsilon E^{(1)} + \varepsilon^2 E^{(2)} + \dots + \varepsilon^n E^{(n)} + \dots$$

$$\psi_E = \psi^{(0)} + \varepsilon \psi^{(1)} + \varepsilon^2 \psi^{(2)} + \dots + \varepsilon^n \psi^{(n)} + \dots$$

Из (1.54) сразу получаем поправку n -го порядка к энергии (1.33):

$$E^{(n)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(n-1)} \rangle. \quad (1.56)$$

Отсюда находим первую поправку к энергии (1.34):

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle.$$

Теперь исследуем волновую функцию. В нулевом порядке по ε

$$\psi_E = \psi^{(0)} + O(\varepsilon).$$

Подставив это выражение в (1.53) находим волновую функцию в первом порядке:

$$\psi_E = \psi^{(0)} + \varepsilon \underbrace{\hat{G}_0 E^{(1)} \psi^{(0)}}_0 + \varepsilon \underbrace{(-\hat{G}_0 \hat{V} \psi^{(0)})}_{\psi^{(1)}} + O(\varepsilon^2),$$

$$\psi^{(1)} = -\hat{G}_0 \hat{V} \psi^{(0)}.$$

Это даёт возможность найти уже вторую поправку к энергии:

$$E^{(2)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(1)} \rangle = -\langle \psi^{(0)} | \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle.$$

Волновая функция во втором порядке по ε

$$\psi_E = \psi^{(0)} + \hat{G}_0 (\varepsilon E^{(1)} - \varepsilon \hat{V}) (\psi^{(0)} + \varepsilon \psi^{(1)}) = \psi^{(0)} + \varepsilon \underbrace{(-\hat{G}_0 \hat{V}) \psi^{(0)}}_{\psi^{(1)}} + \varepsilon^2 \underbrace{\hat{G}_0 (E^{(1)} - \hat{V}) \psi^{(1)}}_{\psi^{(2)}},$$

$$\psi^{(2)} = \hat{G}_0 (E^{(1)} - \hat{V}) (-\hat{G}_0 \hat{V}) \psi^{(0)} = \left(\hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} - E^{(1)} \hat{G}_0^2 \hat{V} \right) \psi^{(0)}.$$

Далее получаем уже 3-ю поправку к энергии

$$E^{(3)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} | \psi^{(2)} \rangle = \langle \psi^{(0)} | \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} \hat{G}_0 \hat{V} - E^{(1)} \hat{V} \hat{G}_0^2 \hat{V} | \psi^{(0)} \rangle$$

и т. д.

В базисе невозмущённых стационарных состояний оператор Грина имеет следующие матричные элементы:

$$(G_0)_{bc} = \langle \psi_b^{(0)} | \hat{G}_0 (E_a^{(0)}) | \psi_c^{(0)} \rangle = \begin{cases} \frac{1}{E_b^{(0)} - E_a^{(0)}}, & b = c \neq a, \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Подставляя эти матричные элементы в полученные в данном параграфе формулы, мы можем воспроизвести формулы из параграфа 1.2.

1.6 Оператор Грина в непрерывном спектре

Для уровня энергии непрерывного спектра (если этот уровень не является граничным) после внесения достаточно малого возмущения разрешённый уровень энергии останется разрешённым, но соответствующая волновая функция изменится. Это позволяет ставить задачу стационарной теории возмущений для уровня непрерывного спектра следующим образом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V},$$

$$\hat{H}_0 \psi_E^{(0)} = E \psi_E^{(0)} \text{ уровень непрерывного спектра,}$$

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}) \psi_E = E \psi_E \text{ найти } \psi_E \text{ если решена невозмущённая спектральная задача.} \quad (1.57)$$

Перепишем уравнение (1.57) вынеся возмущение в правую часть

$$(\hat{H}_0 - E) \psi_E = \underbrace{-\varepsilon \hat{V} \psi_E}_{\text{рассмотрим как неоднородность}}. \quad (1.58)$$

Такая задача теории возмущений возникнет при рассмотрении 3-мерной задачи рассеяния (см. § 10.3 «Интегральное уравнение рассеяния»), там с её помощью мы получим борновское приближение теории рассеяния.

Общее решение неоднородного линейного уравнения может быть представлено как сумма частного решения неоднородного уравнения и общего решения однородного уравнения. В нашем случае

$$(\hat{H}_0 - E^{(0)}) \psi^{(0)} = 0 \text{ — однородное уравнение}$$

совпадает с невозмущённым уравнением Шрёдингера.

Частное решение неоднородного уравнения может быть получено из неоднородности действием некоторого линейного оператора (*оператора Грина*), который обозначим $\hat{G}_0(E) = \hat{G}_0$. Тогда мы получаем

$$\psi_E = \psi^{(0)} + \varepsilon (-\hat{G}_0 \hat{V}) \psi_E. \quad (1.59)$$

Для состояний ортогональных к $\psi_E^{(0)}$

$$\hat{G}_0 = \hat{G}_0(E) = (\hat{H}_0 - E)^{-1}.$$

Но сейчас мы имеем дело с непрерывным спектром. Условие $\langle \psi_E^{(0)} | \delta \psi_E \rangle = 0$ также как условие $\psi(x = 0) = 0$ — не выделяет замкнутого подпространства (для каждой частичной суммы ряда Фурье может выполняться и при этом не выполняться для суммы ряда). В теории возмущений для дискретного уровня возникали суммы по всем уровням, за исключением данного: $\sum_b' = \sum_{b \neq a}$. В непрерывном случае суммы заменяются на интегралы, но интегрировать по прямой с выколотой точкой бессмысленно: одна точка имеет меру нуль и вклада в интеграл не даёт.

Чтобы доопределить функцию (оператор) Грина задают правило обхода полюса. В физических задачах правило обхода задаётся с помощью бесконечномалой мнимой добавки к энергии $E \rightarrow E + i0$:

$$\hat{G}_0 = \hat{G}_0(E + i0) = (\hat{H}_0 - E - i0)^{-1}.$$

Ниже в параграфе 1.8 «Квазистационарные уровни» обход полюса осуществляется как раз таким образом.

Определившись в оператором Грина вернёмся к задаче (1.58).

В нулевом порядке по ε волновая функция совпадает с невозмущённой:

$$\psi_E = \psi_E^{(0)} + O(\varepsilon).$$

Подставим это выражение в правую часть уравнения (1.59) и получим волновую функцию в первом порядке по ε :

$$\psi_E = \psi_E^{(0)} + \varepsilon (-\hat{G}_0 \hat{V}) \psi_E^{(0)} + O(\varepsilon^2).$$

Во втором порядке получаем

$$\psi_E = \psi_E^{(0)} + \varepsilon (-\hat{G}_0 \hat{V}) \psi_E^{(0)} + \varepsilon^2 (-\hat{G}_0 \hat{V})^2 \psi_E^{(0)} + O(\varepsilon^3).$$

Вид общего члена ряда уже ясен, так что мы можем написать ряд теории возмущений целиком:

$$\psi_E = \psi_E^{(0)} + \varepsilon (-\hat{G}_0 \hat{V}) \psi_E^{(0)} + \varepsilon^2 (-\hat{G}_0 \hat{V})^2 \psi_E^{(0)} + \dots + \varepsilon^n (-\hat{G}_0 \hat{V})^n \psi_E^{(0)} + \dots = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n (-\hat{G}_0 \hat{V})^n \right) \psi_E^{(0)} = (\hat{1} + \varepsilon \hat{G}_0 \hat{V})^{-1} \psi_E^{(0)}$$

Мы столкнулись с операторной геометрической прогрессией как в главе 0.

(**?) Каков смысл ряда?

$$(\hat{1} + \varepsilon \hat{G}_0 \hat{V})^{-1} = \left[\hat{G}_0 \left(\hat{G}_0^{-1} + \varepsilon \hat{V} \right) \right]^{-1} = \left(\hat{G}_0^{-1} + \varepsilon \hat{V} \right)^{-1} \hat{G}_0^{-1} = \underbrace{\left(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V} - E - i0 \right)^{-1}}_{\hat{G}(E+i0)} (\hat{H}_0 - E - i0) = \hat{G}(\hat{H}_0 - E - i0).$$

Здесь $\hat{G} = \hat{G}(E + i0)$ — это тоже оператор Грина, но уже построенный по гамильтониану $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}$.

Можно переписать исходную задачу (1.58) в виде

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V} - E - i0) \psi_E = (\hat{H}_0 - E - i0) \psi_E^{(0)}$$

После этого мы делим уравнение на оператор в из левой части и получаем

$$\psi_E = \underbrace{(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V} - E - i0)^{-1}}_{\hat{G}} (\hat{H}_0 - E - i0) \psi_E^{(0)} = (\hat{1} + \varepsilon \hat{G}_0 \hat{V})^{-1} \psi_E^{(0)}.$$

Выражения получились, конечно, красивые, но математически плохо определённые. Их более строгим определением (но всё равно на физическом уровне строгости) можно считать предшествовавшие выкладки. (/**?)

1.7 От оператора Грина к функции Грина-

Рассмотрим уравнение на оператор Грина в непрерывном спектре

$$(\hat{H} - E - i0) \hat{G} = \hat{1}. \quad (1.60)$$

Чтобы задать оператор Грина достаточно определить его действие на все векторы какого-либо базиса. Возьмём координатный базис состояний из векторов³ $|\mathbf{r}'\rangle = |\psi_{\mathbf{r}'}\rangle$ и подействуем соответствующими кет-векторами справа на уравнение (1.60)

$$(\hat{H} - E - i0) \hat{G} |\mathbf{r}'\rangle = \hat{1} |\mathbf{r}'\rangle. \quad (1.61)$$

Нам надо найти векторы состояния вида $\hat{G} |\mathbf{r}'\rangle$. Для этого разложим уравнение (1.61) по координатному базису:

$$\langle \mathbf{r} | (\hat{H} - E - i0) \hat{G} |\mathbf{r}'\rangle = \langle \mathbf{r} | \hat{1} |\mathbf{r}'\rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.62)$$

Левая часть равенства — это действие оператора $(\hat{H} - E - i0)$ на кет-вектор $\hat{G} |\mathbf{r}'\rangle$ в координатном представлении

$$(\hat{H} - E - i0) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.63)$$

Здесь

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \hat{G} |\mathbf{r}'\rangle \quad (1.64)$$

— это *функция Грина*. Стрелка в формуле (1.63) показывает на переменную, на которую действует оператор $(\hat{H} - E - i0)$, точнее оператор действует на функцию одной переменной \mathbf{r} , которая получается из функции Грина (функции двух переменных) фиксированием переменной \mathbf{r}' .

Пусть гамильтониан, а вместе с ним и оператор $(\hat{H} - E - i0)$, инвариантен по отношению к координатным сдвигам, то есть коммутирует с оператором импульса $\hat{\mathbf{p}}$. Тогда функцию Грина можно искать в виде

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

оператор Гамильтона выражается как функция от оператора импульса⁴ $\hat{H} = H(\hat{\mathbf{p}})$, и уравнение (1.63) приобретает вид

$$(H(\hat{\mathbf{p}}) - E - i0) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (1.65)$$

³Базисные векторы координатного базиса (размерность пространства пока произвольная!) в координатном представлении имеют вид $\psi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

⁴Мы считаем, что полный набор коммутирующих наблюдаемых для рассматриваемой системы — это \mathbf{r} или \mathbf{p} , например рассматривается частица, которая не имеет внутренних степеней свободы.

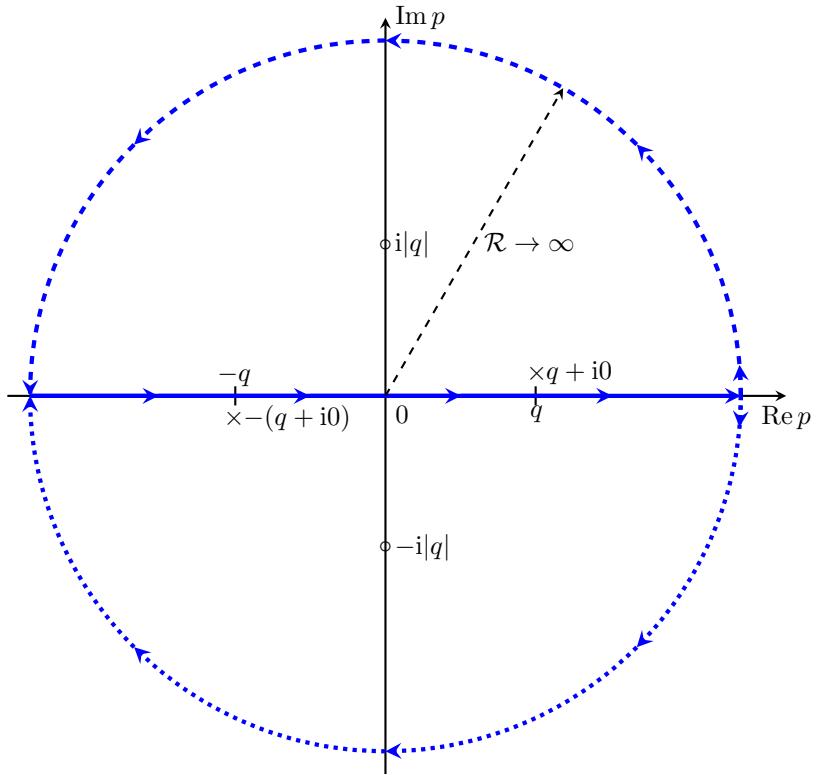


Рис. 1.1: Контуры интегрирования в формуле (1.71). При $x > 0$ контур замыкается через верхнюю полуплоскость (широкой дугой), а при $x < 0$ — через нижнюю (пунктирной дугой). Смешанные положения полюсов при $E > 0$ обозначены крестиками (\times). При $E < 0$ полюсы $\pm i|q|$ располагаются на мнимой оси (кружки \circ)

Определим для функции Грина преобразование Фурье⁵:

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) = \int e^{-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} G(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.66)$$

Теперь уравнение (1.65) перепишется как алгебраическое уравнение

$$(H(\mathbf{p}) - E - i0)\tilde{G}(\mathbf{p}) = 1, \quad (1.67)$$

которое легко решается

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) = \frac{1}{H(\mathbf{p}) - E - i0}. \quad (1.68)$$

К координатному представлению мы можем вернуться с помощью обратного преобразования Фурье:

$$G(\mathbf{r}) = \int e^{i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}} \tilde{G}(\mathbf{p}) \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^D} = \int \frac{e^{i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}}}{H(\mathbf{p}) - E - i0} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^D}, \quad (1.69)$$

где D — размерность пространства.

Для свободной нерелятивистской частицы

$$H(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

при этом удобно параметризовать энергию с помощью параметра q , имеющего размерность импульса:

$$E = \frac{q^2}{2m}, \quad q > 0.$$

⁵Преобразование Фурье для функции Грина мы определяем иначе, чем для волновой функции

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int \frac{e^{-i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{D/2}} \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

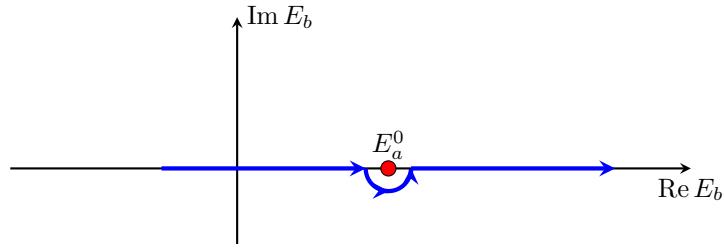


Рис. 1.2: Обход полюса

$$G(\mathbf{r}) = \int \frac{e^{i\frac{p\mathbf{r}}{\hbar}}}{\frac{p^2}{2m} - \frac{q^2}{2m} - i0} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^D} = 2m \int \frac{e^{i\frac{p\mathbf{r}}{\hbar}}}{(p - q - i0)(p + q + i0)} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^D}. \quad (1.70)$$

Знаки перед $i0$ в выражении $(p - q - i0)(p + q + i0)$ выбраны так, чтобы давать $p^2 - q^2 - i0$ (то есть давать правильный обход полюсов в точках $\pm q$) в случае $E > 0$ и $q > 0$. В случае $E < 0$ полюсы расположены на мнимой оси и добавки $\pm i0$ уже не важны (не нужны, но и не мешают).

Вычислим явно функцию Грина $G(\mathbf{r})$ для размерностей пространства $D = 1$ (случай $D = 3$ будет рассмотрен в § 10.3 «Интегральное уравнение рассеяния»).

При $D = 1$ ($\mathbf{r} = x$, $\mathbf{p} = p$)

$$G(x) = 2m \int \frac{e^{i\frac{px}{\hbar}}}{(p - q - i0)(p + q + i0)} \frac{dp}{2\pi\hbar}. \quad (1.71)$$

Контур интегрирования замыкаем через верхнюю полуплоскость при $x > 0$ и через нижнюю полуплоскость при $x < 0$ (см. рис. 1.1), потому что экспонента $e^{i\frac{px}{\hbar}}$ затухает при $\text{Im} px > 0$. Так что при $x > 0$ ($x < 0$) вклад даёт полюс в точке $\pm(q + i0)$, причём поскольку полюс обходится против (по) часовой стрелке, вычет берётся со знаком \pm .

Получаем при $x > 0$ (верхние знаки) и при $x < 0$ нижние знаки функцию Грина при $E > 0$

$$G(x) = 2m \underbrace{\left(\pm 2\pi i \frac{e^{\pm i\frac{qx}{\hbar}}}{\pm 2q} \frac{1}{2\pi\hbar} \right)}_{\pm \text{вычет}} = i m \frac{e^{i\frac{qx}{\hbar}}}{q\hbar}. \quad (1.72)$$

При $E < 0$ работает эта же формула, только надо считать, что $q = i|q|$, т. е. лежит на положительной полуоси $\text{Im} p$:

$$G(x) = 2m \underbrace{\left(\pm 2\pi i \frac{e^{\pm i\frac{|q|x}{\hbar}}}{\pm 2i|q|} \frac{1}{2\pi\hbar} \right)}_{\pm \text{вычет}} = m \frac{e^{-\frac{|q|\cdot|x|}{\hbar}}}{q\hbar}. \quad (1.73)$$

Вид функции $G(x)$ при $E < 0$ соответствует виду связанного состояния частицы в 1-мерной δ -яме, для которой E — стационарный уровень. Легко убедиться (см. упражнение 4), что это совпадение не случайно.

1.8 Квазистационарные уровни

Пусть для невозмущённого гамильтониана дискретный уровень энергии попал внутрь непрерывного спектра. Такое возможно, например, при объединении двух невзаимодействующих подсистем.

$$E_a^{(2)} = \sum_{b \neq a} \frac{|V_{ba}|^2}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} + \int \frac{|V_{ba}|^2 db}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} = \sum_{b \neq a} \frac{|V_{ba}|^2}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}} + \int \frac{|V_{ba}|^2 \rho(E_b) dE_b}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}.$$

Здесь $\rho(E_b)$ — плотность числа уровней с энергией близкой к E_b . Если уровень $E_a^{(0)}$ попадает внутрь непрерывного спектра, то он попадает внутрь области интегрирования по энергии E_b и в интеграле появляется полюс.

При обходе полюса снизу, как на рис. 1.2 интеграл разбивается на два слагаемых: интеграл в смысле главного значения (f) от интегрирования по вещественной оси и половина вычета от интегрирования по

половине окружности⁶:

$$E_a^{(2)} = \underbrace{\sum_{b \neq a} \frac{|V_{ba}|^2}{E_a^{(0)} - E_b^{(0)}}}_{\text{вещественная поправка}} + \underbrace{\int \frac{|V_{ba}|^2 \rho(E_b) dE_b}{E_a^{(0)} - E_b}}_{\text{мнимая поправка}} - i\pi \rho(E_a) |V_{ba}|^2_{E_b = E_a^{(0)}}.$$

Поскольку уровни энергии для любого эрмитового гамильтониана могут быть только вещественными, появление мнимой поправки требует интерпретации.

Посмотрим как будет вести себя со временем «стационарный» уровень с комплексной энергией

$$E = E_0 - i\frac{\gamma\hbar}{2}.$$

$$\psi_E(t) = e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} \psi_E(0) = e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{\gamma t}{2}} \psi_E(0). \quad (1.74)$$

Вещественная экспонента приводит к тому, что скалярный квадрат такого состояния не сохраняется со временем:

$$\|\psi_E(t)\|^2 = e^{-\gamma t} \|\psi_E(0)\|^2.$$

Поскольку скалярный квадрат состояния соответствует суммарной вероятности нахождения системы в таком состоянии, мнимая добавка даёт нам экспоненциальное затухание этой вероятности со временем с временем жизни

$$\tau = \frac{1}{\gamma}.$$

Поскольку мнимая добавка возникла за счёт взаимодействия невозмущённого дискретного уровня с состояниями непрерывного спектра (которые не могут быть нормированы на 1), вероятность «утекает» из дискретного состояния в состояния непрерывный спектр и, в конечном итоге, утекает на бесконечность (туда, где расходится интеграл для скалярного квадрата состояния непрерывного спектра). Такое состояние уже не будет стационарным, но на временах малых по сравнению с τ оно ведёт себя почти как стационарное (*квазистационарное*).

Фурье-образ для временной зависимости квазистационарного состояния (1.74) имеет характерную ширину γ , соответственно мнимая поправка оказывается связана также с характерной шириной уровня

$$\delta E = \frac{\gamma\hbar}{2}.$$

Настоящий стационарный уровень имеет нулевую ширину, тогда как квазистационарный уровень — конечную ширину δE .

(!!) На самом деле многие состояния, которые мы рассматривали как стационарные при более детальном рассмотрении оказываются квазистационарными. Например, все уровни энергии атома водорода кроме основного имеют конечное время жизни, за счёт излучения фотонов (взаимодействия с электромагнитным полем).

(*) Может показаться, что мы применили стационарную теорию за пределами её области применимости. Более правильно было бы рассмотреть распад квазистационарного уровня с точки зрения нестационарной теории возмущений. Это мы сделаем в следующей главе, причём в первом порядке нестационарной теории возмущений мы получим тот же результат, что и здесь:

$$\frac{\gamma\hbar}{2} = \pi \rho(E_a) |V_{ba}|^2_{E_b = E_a^{(0)}}. \quad (1.75)$$

Этот результат известен как *золотое правило Ферми*.

(**) Мы убедились, что во многих случаях уровни энергии имеют *маленькую отрицательную мнимую добавку*. Между тем, доопределяя оператор Грина в непрерывном спектре мы вводили для энергии *малую положительную мнимую добавку*, что в свете рассмотрения квазистационарных уровней выглядит противоречиво. Чтобы примирить одно с другим посмотрим на эту добавку с другой стороны. Эту мнимую добавку можно рассматривать как добавку не к энергии E , для которой считается оператор Грина, а к гамильтониану \hat{H}_0 , к которому получается уже мнимая отрицательная добавка:

$$\hat{G}_0 = ([\hat{H}_0 - i0] + E)^{-1}.$$

⁶Мы по существу вывели формулу Сохоцкого

$$\frac{1}{x + i0} = \text{v.p.} \frac{1}{x} - i\pi \delta(x).$$

Эту формулу называют ещё формулой Племеля, но Сохоцкий получил эквивалентный результат в 1868 году, а Племель — в 1908, т. е. на 40 лет позже (понятно, что ни Сохоцкий ни Племель не использовали дельта-функцию Дирака).

Можно сказать, что мы сделали все уровни нового гамильтониана $\hat{H}'_0 = \hat{H}_0 - i0$ слегка квазистационарными.

В некоторых случаях квазистационарные состояния можно исследовать с помощью квазиклассического приближения, см. КПКМ-13.5.6 «Квазистационарные состояния в квазиклассике» (стр. 410).

Глава 2

Представление взаимодействия

2.1 Определение представления взаимодействия

Представим оператор Гамильтона в виде суммы двух слагаемых — *невозмущённого гамильтониана* и *возмущения*:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{V}(t). \quad (2.1)$$

Для *полного гамильтониана* \hat{H} имеется *полный оператор эволюции* $\hat{U}(t_1, t_0)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{U}(t_1, t_0) = \hat{H}(t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (2.2)$$

Для *невозмущённого гамильтониана* \hat{H}_0 имеется *невозмущённый оператор эволюции* $\hat{U}_0(t_1, t_0)$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{U}_0(t_1, t_0) = \hat{H}_0(t_1) \hat{U}_0(t_1, t_0), \quad \hat{U}_0(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (2.3)$$

Для сопряжённого невозмущённого оператора эволюции уравнение получается с помощью эрмитова сопряжения:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{U}_0(t_1, t_0) \right)^\dagger = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0) = \hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0) \hat{H}_0^\dagger(t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0) \hat{H}_0(t_1). \quad (2.4)$$

Далее если оператор эволюции имеет только один аргумент, это означает, что второй аргумент зафиксирован:

$$\hat{U}(t) := \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}_0(t) := \hat{U}_0(t, t_0), \quad \hat{U}_B(t) := \hat{U}_B(t, t_0). \quad (2.5)$$

Примем по определению, что наблюдаемые эволюционируют так же, как в гайзенберговском представлении для *невозмущённого гамильтониана*:

$$\frac{d_0 \hat{F}_B}{dt} = \left(\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right)_B + \{ \hat{F}_B, \hat{H}_0 \}_\hbar = \frac{\partial \hat{F}_B}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}_0]; \quad \hat{F}_B(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{F}_m(t) \hat{U}_0(t). \quad (2.6)$$

Здесь $\frac{d_0}{dt}$ полная производная по времени, определяемая с помощью *невозмущённого гамильтониана* \hat{H}_0 .

(!) Индекс «*в*» означающий представление взаимодействия мы будем писать сверху или снизу в зависимости от удобства. Никакого различия верхнее или нижнее положение индекса «*в*» не подразумевает.

Вклад возмущения учитывается через эволюцию состояния.

Для вектора состояния (волновой функции):

$$\psi_B(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \psi_m(t) = \underbrace{\hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}(t)}_{\hat{U}_B(t)} \psi_m(0). \quad (2.7)$$

(*) Для матрицы плотности:

$$\hat{\rho}_B(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{\rho}_m(t) \hat{U}_0(t) = \underbrace{\hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}(t)}_{\hat{U}_B(t)} \hat{\rho}_m(0) \underbrace{\hat{U}^\dagger(t) \hat{U}_0(t)}_{\hat{U}_B^\dagger(t)}. \quad (2.8)$$

Выражение

$$\hat{U}_B(t) = \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{U}(t) \quad (2.9)$$

называют *оператором эволюции в представлении взаимодействия*. Если его продифференцировать по времени, используя уравнения (2.2) и (2.4), получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_B(t) &= i\hbar \frac{\partial \hat{U}_0^\dagger(t)}{\partial t} \hat{U}(t) + \hat{U}_0^\dagger(t) i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \\ &= \hat{U}_0^\dagger(t)(-\hat{H}_0) \hat{U}(t) + \hat{U}_0^\dagger(t)(\hat{H}_0(t) + \hat{V}(t))\hat{U}(t) = \\ &= \hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V}(t) \hat{U}(t) = \underbrace{\hat{U}_0^\dagger(t) \hat{V}(t) \hat{U}_0(t)}_{\hat{V}_B(t)} \hat{U}_B(t). \end{aligned}$$

Мы получили уравнение на оператор эволюции в представлении взаимодействия:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t_1} \hat{U}_B(t_1, t_0) = \hat{V}_B(t_1) \hat{U}_B(t_1, t_0), \quad \hat{U}_B(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (2.10)$$

Комбинируя уравнения (2.7) и (2.10) получаем *уравнение Шрёдингера в представлении взаимодействия*

$$i\hbar \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = \hat{V}_B(t) \psi_B. \quad (2.11)$$

(*) Матрица плотности эволюционирует в соответствии с *уравнением фон Неймана в представлении взаимодействия*, в котором роль гамильтониана играет оператор возмущения в представлении взаимодействия:

$$\frac{\partial \hat{\rho}_B}{\partial t} = -\{\hat{\rho}_B, \hat{V}_B\}_h = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}_B, \hat{V}_B]. \quad (2.12)$$

Если вспомнить, что оператор эволюции — аналог матрицы вращения, то представление взаимодействия отличается тем, что все объекты задаются во вращающемся базисе так, что компенсируется вклад в эволюцию (вращение) состояний невозмущённого гамильтониана.

(!) Если положить $\hat{H}_0 = \hat{H}$, $\hat{V} = 0$, то представление взаимодействия совпадёт с представлением Гайзенберга.

(!) Если положить $\hat{H}_0 = 0$, $\hat{V} = \hat{H}$, то представление взаимодействия совпадёт с представлением Шрёдингера.

Название «представление взаимодействия» связано с тем, что во многих задачах возмущение $\hat{V}(t)$ соответствует взаимодействию подсистем, которые для невозмущённого гамильтониана $\hat{H}_0(t)$ были невзаимодействующими.

2.2 Прецессия спина во вращающемся поле

Обычно представление взаимодействия используется в нестационарной теории возмущений, когда $\hat{V}(t)$ — малая поправка к «хорошему» невозмущённому гамильтониану $H_0(t)$. Однако мы можем использовать представление взаимодействия вне зависимости от теории возмущений, в некоторых случаях оно позволяет аналитически решить временное уравнение Шрёдингера. Такого рода пример мы сейчас рассмотрим.

Пусть имеется частица со спином s и магнитным моментом $\hat{\mu} = \mu_0 \hat{s}$. Эволюция спина в магнитном поле \mathbf{B} описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = -(\hat{\mu}, \mathbf{B}).$$

Рассмотрим случай, когда магнитное поле вращается вокруг оси z с угловой скоростью Ω :

$$\mathbf{B} = (b \cos(\Omega t), b \sin(\Omega t), B_0).$$

Соответствующий гамильтониан

$$\hat{H} = -(\hat{\mu}, \mathbf{B}) = -\underbrace{\mu_0 b}_{\hbar\omega} (\cos(\Omega t) \hat{s}_x + \sin(\Omega t) \hat{s}_y) - \underbrace{\mu_0 B_0}_{\hbar\omega_0} \hat{s}_z = -\hbar\omega (\cos(\Omega t) \hat{s}_x + \sin(\Omega t) \hat{s}_y) - \hbar\omega_0 \hat{s}_z.$$

Гамильтониан оказался записан через три параметра с размерностью частоты: Ω, ω, ω_0 .

Гамильтониан не является автономным (явно зависит от времени), поэтому записать оператор эволюции через матричную экспоненту мы не можем.

Попробуем использовать представление взаимодействия. Для этого нам понадобится разбить гамильтониан на два слагаемых: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$. Причём удобно провести разбиение так, чтобы невозмущённый гамильтониан \hat{H}_0 не зависел от времени.

2.2.1 Первая попытка решения

Кажется естественным положить

$$\hat{H}_0 = -\hbar\omega_0 \hat{s}_z = -\hbar\omega_0 \hat{s}_z^B, \quad (2.13)$$

$$\hat{V} = -\hbar\omega(\cos(\Omega t) \hat{s}_x + \sin(\Omega t) \hat{s}_y). \quad (2.14)$$

Тогда невозмущённый оператор эволюции

$$\hat{U}_0(t) = e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} = e^{i\omega_0 t \hat{s}_z}$$

— это спиновый оператор поворота вокруг оси z на угол $-\omega_0 t$. Таким образом, при переходе в представление взаимодействия на вращение магнитного поля вокруг оси z с частотой Ω накладывается вращение вокруг той же оси с частотой ω_0 .

Некоторые сомнения могут быть лишь по поводу направления вращений: складываются угловые скорости или вычитаются. Чтобы разрешить эти сомнения вычислим производную по времени от возмущения в представлении взаимодействия.

Выпишем гамильтонианы в представлении взаимодействия.

Невозмущённый гамильтониан коммутирует с невозмущённым оператором эволюции (который является его экспонентой), поэтому в представлении взаимодействия он не меняется:

$$\hat{H}_0^B = \hat{H}_0 = -\hbar\omega_0 \hat{s}_z = -\hbar\omega_0 \hat{s}_z^B,$$

Оператор возмущения выражается через проекции спина. Чтобы перейти к представлению взаимодействия для возмущения мы просто берём проекции спина в представлении взаимодействия:

$$\hat{V}_B(t) = -\hbar\omega(\cos(\Omega t) \hat{s}_x^B(t) + \sin(\Omega t) \hat{s}_y^B(t)).$$

Для временной эволюции проекций спина в представлении взаимодействия получаем

$$\begin{aligned} \frac{d_0 \hat{s}_x^B}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{s}_x^B, \hat{H}_0] = i\omega_0 \underbrace{[\hat{s}_x^B, \hat{s}_z^B]}_{-i\hat{s}_y^B} = \omega_0 \hat{s}_y^B, \\ \frac{d_0 \hat{s}_y^B}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{s}_y^B, \hat{H}_0] = i\omega_0 \underbrace{[\hat{s}_y^B, \hat{s}_z^B]}_{i\hat{s}_x^B} = -\omega_0 \hat{s}_x^B. \end{aligned}$$

Получившаяся система соответствует вращению вокруг оси z , с учётом начальных условий

$$\hat{s}_x^B(0) = \hat{s}_x^{\text{III}} = \hat{s}_x, \quad \hat{s}_y^B(0) = \hat{s}_y^{\text{III}} = \hat{s}_y$$

получаем временну́ю зависимость

$$\begin{aligned} \hat{s}_x^B(t) &= \hat{s}_x \cos(\omega_0 t) + \hat{s}_y \sin(\omega_0 t), \\ \hat{s}_y^B(t) &= -\hat{s}_x \sin(\omega_0 t) + \hat{s}_y \cos(\omega_0 t). \end{aligned}$$

Таким образом

$$\begin{aligned} \hat{V}_B(t) &= -\hbar\omega \{ \cos(\Omega t) [\hat{s}_x \cos(\omega_0 t) + \hat{s}_y \sin(\omega_0 t)] + \sin(\Omega t) [-\hat{s}_x \sin(\omega_0 t) + \hat{s}_y \cos(\omega_0 t)] \} = \\ &= -\hbar\omega \{ [\cos(\Omega t) \cos(\omega_0 t) - \sin(\Omega t) \sin(\omega_0 t)] \hat{s}_x + [\cos(\Omega t) \sin(\omega_0 t) + \sin(\Omega t) \cos(\omega_0 t)] \hat{s}_y \} = \\ &= -\hbar\omega \{ \cos([\Omega + \omega_0] t) \hat{s}_x + \sin([\Omega + \omega_0] t) \hat{s}_y \}. \end{aligned}$$

Возмущение в представлении взаимодействия по-прежнему зависит от времени, кроме исключительного случая $\Omega = -\omega_0$. В этом исключительном случае

$$\hat{V}_B(t) = -\hbar\omega \hat{s}_x.$$

Оператор эволюции в представлении взаимодействия в этом случае — спиновый оператор поворота вокруг оси x на угол $-\omega t$:

$$\hat{U}_B(t) = e^{-i\frac{\hat{V}_B t}{\hbar}} = e^{i\omega t \hat{s}_x}.$$

2.2.2 Вторая попытка решения

Если внимательно рассмотреть первую попытку решения, то мы видим, что при вращении вокруг оси z преобразуются компоненты спина по осям x и y , а компонента по оси z остаётся неизменной. Это позволяет прийти к выводу, что разбиение гамильтониана на невозмущённую часть (2.13) и возмущение (2.14) неоптимально.

Удобнее выбрать такой невозмущённый гамильтониан, чтобы он при переходе к представлению взаимодействия в точности компенсировал вращение магнитного поля.

$$\hat{H}_0 = \hbar\Omega\hat{s}_z = \hbar\Omega\hat{s}_z^B,$$

$$\hat{V} = -\hbar\omega(\cos(\Omega t)\hat{s}_x + \sin(\Omega t)\hat{s}_y) - \hbar(\omega_0 + \Omega)\hat{s}_z.$$

В представлении взаимодействия вращение магнитного поля полностью компенсируется:

$$\hat{V}^B = -\hbar\omega\hat{s}_x - \hbar(\omega_0 + \Omega)\hat{s}_z.$$

Оператор эволюции в представлении взаимодействия в этом случае — спиновый оператор поворота с угловой скоростью $\vec{\omega} = (-\omega, 0, -\omega_0 - \Omega)$:

$$\hat{U}_B(t) = e^{-i\frac{\hat{V}_B t}{\hbar}} = e^{it(\omega\hat{s}_x + [\omega_0 + \Omega]\hat{s}_z)}.$$

Полный оператор эволюции имеет вид

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_0(t)\hat{U}_B(t) = e^{-i\Omega t\hat{s}_z}e^{it(\omega\hat{s}_x + [\omega_0 + \Omega]\hat{s}_z)}.$$

Направление среднего спина вращается заметая поверхность конуса с осью $\vec{\omega} = (-\omega, 0, -\omega_0 - \Omega)$, в свою очередь конус вращается с угловой скоростью $\vec{\Omega} = (0, 0, \Omega)$.

В данной задаче использование представления взаимодействия соответствует переходу во вращающуюся систему отсчёта.

2.3 Т-экспонента

Рассмотрим уравнение на оператор эволюции в представлении взаимодействия (2.10):

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_B(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar}\hat{V}_B(t)\hat{U}_B(t, t_0), \quad \hat{U}_B(t_0, t_0) = \hat{1}. \quad (2.15)$$

Мы можем взять от уравнения (2.15) определённый интеграл по времени от t_0 до t_1 и переписать уравнение (2.15) в виде интегрального уравнения

$$\hat{U}_B(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_B(t_1)\hat{U}_B(t_1, t_0) dt_1. \quad (2.16)$$

Интегральное уравнение (2.16) можно решать методом последовательных приближений, разлагая решение по степеням \hat{V} . С точностью до нулевого порядка

$$\hat{U}_B^{(0)}(t, t_0) = \hat{1}.$$

Если мы знаем оператор эволюции с точностью до n -го порядка, мы можем получить следующее $(n+1)$ -е приближение подставляя в правую часть уравнения (2.16)

$$\hat{U}_B^{(n+1)}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_B(t_1)\hat{U}_B^{(n)}(t_1, t_0) dt_1. \quad (2.17)$$

Выпишем первые два приближения

$$\hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_B(t_1) dt_1. \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned}
\hat{U}_{\text{B}}^{(2)}(t, t_0) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{V}_{\text{B}}(t_2) dt_2 \right) dt_1 = \\
&= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_{\text{B}}(t_1) dt_1 + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \hat{V}_{\text{B}}(t_2)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

Легко видеть, что каждое следующее приближение добавляет к предыдущим членам новый интеграл на единицу большей кратности. Весь ряд разложения по степеням \hat{V} имеет вид (мы перенумеровали переменные интегрирования t_1, \dots, t_n в обратном порядке)

$$\hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \underbrace{\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1}_{n \text{ раз}} \underbrace{\hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1)}_{n \text{ раз}}. \tag{2.20}$$

В члене номер n область интегрирования определяется неравенствами

$$\underbrace{t}_{\text{const}} \geq \underbrace{t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_1}_{\text{переменные интегрирования}} \geq \underbrace{t_0}_{\text{const}}. \tag{2.21}$$

В нашей области интегрирования (кроме граничных точек) переменные t_k всегда убывают по мере роста k . Если бы мы интегрировали по n -мерному кубу, т. е. от t_0 до t по всем переменным t_1, t_2, \dots, t_n , то в разных частях куба (за исключением граничных точек) переменные t_1, t_2, \dots, t_n в порядке убывания выстраивались бы всеми возможными $n!$ способами. Отсюда видно, что область интегрирования составляет $\frac{1}{n!}$ часть n -мерного куба.

При $n = 1$ — это отрезок, при $n = 2$ — треугольник ($\frac{1}{2!} = \frac{1}{2}$ квадрата), при $n = 3$ — это тетраэдр ($\frac{1}{3!} = \frac{1}{6}$ куба) и т. д. При произвольном n область интегрирования — n -мерный симплекс, составляющий $\frac{1}{n!}$ часть n -мерного куба.

Если бы оператор $\hat{V}_{\text{B}}(t)$ был перестановочен сам с собой в разные моменты времени, т. е. если бы $[\hat{V}_{\text{B}}(t_1), \hat{V}_{\text{B}}(t_2)] = 0$, то мы бы могли заменить интегрирование по симплексу интегрированием по кубу, добавив множитель $\frac{1}{n!}$. Если же оператор $\hat{V}_{\text{B}}(t)$ некоммутирует сам с собой в разные моменты времени, то чтобы перейти к интегрированию по кубу нам придётся в каждом из $n!$ симплексов, на которые разбивается куб, по-разному упорядочивать множители $\hat{V}_{\text{B}}(t_n), \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}), \dots, \hat{V}_{\text{B}}(t_1)$.

Введём операцию Т-упорядочения, которая расставляет множители в порядке убывания временного аргумента. Так для двух множителей

$$\hat{T} \hat{V}_{\text{B}}(t_2) \hat{V}_{\text{B}}(t_1) = \begin{cases} \hat{V}_{\text{B}}(t_2) \hat{V}_{\text{B}}(t_1), & t_2 \geq t_1, \\ \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \hat{V}_{\text{B}}(t_2), & t_1 \geq t_2. \end{cases}$$

В общем случае

$$\hat{T} \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1) = \hat{V}_{\text{B}}(t_{i_n}) \hat{V}_{\text{B}}(t_{i_{n-1}}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_{i_1}), \quad \{i_1, \dots, i_n\} = \{1, \dots, n\}, \quad t_{i_n} \geq t_{i_{n-1}} \geq \dots \geq t_{i_1}. \tag{2.22}$$

С помощью Т-упорядочения мы можем переписать n -мерный интеграл из разложения (2.20) как интеграл по n -мерному кубу:

$$\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1) = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 \hat{T} \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1).$$

Если договориться, что операцию \hat{T} можно выносить из под интеграла и за скобки, то формулу (2.20) можно переписать в следующем виде

$$\hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \hat{T} \left(\hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \right). \tag{2.23}$$

Очень хочется сделать следующее преобразование

$$\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1) = \int_{t_0}^t dt_n \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \int_{t_0}^t dt_{n-1} \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) = \left(\int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \right)^n,$$

но делать такое преобразование нельзя, поскольку после интегрирования не остаётся временных переменных, которые должна упорядочивать операция \hat{T} .

Тем не менее мы сделаем такое преобразование, как чисто символическое, тогда мы можем написать выражение известное как T -экспонента:

$$\hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \hat{T} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \right)^n = \hat{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \right). \quad (2.24)$$

(!!!) T -экспонента — это единое обозначение, подразумевающее, что мы разлагаем экспоненту в ряд, переписываем n -ю степень интеграла как интеграл по n -мерному кубу и вносим под интеграл операцию T -упорядочения \hat{T} .

$$\hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \underbrace{\hat{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \right)}_{\text{символическая запись}} = \underbrace{\hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 \hat{T} \hat{V}_{\text{B}}(t_n) \hat{V}_{\text{B}}(t_{n-1}) \dots \hat{V}_{\text{B}}(t_1)}_{\text{настоящее определение } T\text{-экспоненты}}. \quad (2.25)$$

T -экспонента — это сокращённая запись ряда в формуле (2.25) или в формуле (2.20)

(!!) Если сначала взять интеграл, потом вычислить от интеграла экспоненту, то получившееся выражение будет зависеть только от t и t_0 и операции \hat{T} будет не на что действовать.

(!) Если оператор $\hat{V}_{\text{B}}(t)$ перестановчен сам с собой в разные моменты времени, то операция T -упорядочения оказывается ненужной, тогда мы действительно можем сначала взять интеграл, а потом от него экспоненту:

$$[\hat{V}_{\text{B}}(t_1), \hat{V}_{\text{B}}(t_2)] = 0 \quad \forall t_1, t_2 \in [t_0, t] \quad \Rightarrow \quad \hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}_{\text{B}}(t_1) \right).$$

В частности, есть оператор $\hat{V}_{\text{B}}(t)$ не зависит от времени, то мы получаем для оператора эволюции привычную матричную экспоненту

$$\hat{V}_{\text{B}}(t_1) = \hat{V}_{\text{B}}(t_2) = \hat{V}_{\text{B}} \quad \forall t_1, t_2 \in [t_0, t] \quad \Rightarrow \quad \hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (t - t_0) \cdot \hat{V}_{\text{B}} \right).$$

(п) T -экспонента — общий способ решать уравнения вида

$$\frac{d\vec{v}(t)}{dt} = \hat{A}(t) \vec{v}(t),$$

где \vec{v} — элемент некоторого линейного пространства (конечномерный или бесконечномерный вектор-столбец, или функция), а $\hat{A}(t)$ — некоторый, зависящий от переменной t линейный оператор (конечномерная или бесконечномерная матрица, дифференциальный оператор, интегральный оператор). Различные применения уравнений такого вида в физике, математике и их приложениях едва ли поддаются подсчёту.

2.4 T -экспонента и амплитуды вероятностей**

Для понимания этого параграфа следует вспомнить, что если происходит последовательность процессов, то амплитуда вероятности всей цепочки соответствует произведению амплитуд вероятностей каждого звена. А если процесс может происходить несколькими взаимоисключающими способами, причём в принципе невозможно определить какой способ реализовался, то амплитуда вероятностей процесса соответствует сумме амплитуд каждого из способов.

(→ КПКМ-3.1) Подробнее про амплитуды вероятностей, их сложение и умножения можно почитать в книге М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику», § 3.1 «Вероятности и амплитуды вероятностей» (стр. 49).

Интересно рассмотреть разложение оператора эволюции в представлении взаимодействия (T -экспоненту) с точки зрения сложения и умножения амплитуд вероятностей. Мы возьмём исходное выражение (2.20) для оператора эволюции:

$$\hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1}_{n \text{ раз}} \underbrace{\frac{\hat{V}^{\text{B}}(t_n)}{i\hbar} \frac{\hat{V}^{\text{B}}(t_{n-1})}{i\hbar} \dots \frac{\hat{V}^{\text{B}}(t_1)}{i\hbar}}_{n \text{ раз}}. \quad (2.26)$$

(Здесь $\hat{V}^{\text{B}} \equiv \hat{V}_{\text{B}, \cdot}$)

Запишем матричный элемент оператора эволюции между начальным состоянием $|i\rangle$ и конечным состоянием $\langle f|$:

$$\langle f | \hat{U}_{\text{B}}(t, t_0) | i \rangle = \langle f | i \rangle + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1}_{n \text{ раз}} \sum_{a_{n-1}, a_{n-2}, \dots, a_1} \underbrace{\frac{V_{f a_{n-1}}^{\text{B}}(t_n)}{i\hbar} \frac{V_{a_{n-1} a_{n-2}}^{\text{B}}(t_{n-1})}{i\hbar} \dots \frac{V_{a_1 i}^{\text{B}}(t_1)}{i\hbar}}_{n \text{ раз}}. \quad (2.27)$$

Здесь состояния $|a_k\rangle$ ($k = 1, \dots, n-1$) относятся к некоторому ортонормированному базису в пространстве состояний. Все суммы по a_k берутся по всем базисным состояниям.

Запишем также уравнение Шрёдингера в представлении взаимодействия (2.11) в том же a -базисе:

$$\frac{d}{dt} \psi^{\text{B}}(a) = \sum_b \frac{V_{ab}^{\text{B}}(t)}{i\hbar} \psi^{\text{B}}(b). \quad (2.28)$$

Мы видим, что $\frac{V_{ab}^{\text{B}}(t)}{i\hbar} dt$ — амплитуда вероятности перехода из состояния b в состояние a за бесконечномальный период времени $[t, t + dt]$.

Теперь понятно, что произведение амплитуд

$$\frac{V_{f a_{n-1}}^{\text{B}}(t_n) dt_n}{i\hbar} \frac{V_{a_{n-1} a_{n-2}}^{\text{B}}(t_{n-1}) dt_{n-1}}{i\hbar} \dots \frac{V_{a_1 i}^{\text{B}}(t_1) dt_1}{i\hbar}$$

соответствует амплитуде последовательности переходов

$$i \rightarrow a_1 \rightarrow \dots \rightarrow a_{n-2} \rightarrow a_{n-1} \rightarrow f.$$

Каждый переход осуществляется в промежуток времени $[t_k, t_k + dt_k]$, причём времена переходов по цепочка последовательно нарастают:

$$\begin{array}{ccccccccccccc} i & \rightarrow & a_1 & \rightarrow & \dots & a_{n-2} & \rightarrow & a_{n-1} & \rightarrow & f \\ t_0 & < & t_1 & < & \dots & t_{n-2} & < & t_{n-1} & < & t_n & < & t \end{array} \quad (2.29)$$

В схеме (2.29) момент каждого перехода подписан под соответствующей стрелкой.

Поскольку мы рассматриваем замкнутую квантовую систему, последовательность промежуточных состояний $a_1 \rightarrow \dots \rightarrow a_{n-2} \rightarrow a_{n-1}$ может быть произвольной, поэтому мы должны просуммировать амплитуды вероятностей по всем наборам взаимоисключающих промежуточных состояний, чтобы получить амплитуду перехода из i в f через все возможные цепочки переходов длины n , осуществляющиеся в заданные промежутки времени $[t_k, t_k + dt_k]$:

$$\sum_{a_{n-1}, a_{n-2}, \dots, a_1} \frac{V_{f a_{n-1}}^{\text{B}}(t_n) dt_n}{i\hbar} \frac{V_{a_{n-1} a_{n-2}}^{\text{B}}(t_{n-1}) dt_{n-1}}{i\hbar} \dots \frac{V_{a_1 i}^{\text{B}}(t_1) dt_1}{i\hbar}.$$

Моменты времени, в которые происходят переходы, t_1, \dots, t_n также могут быть произвольными, при условии выполнения неравенств $t \geq t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_1 \geq t_0$. Поэтому по всем моментам времени t_1, \dots, t_n следует проинтегрировать (просуммировать вклад всех допустимых интервалов $[t_k, t_k + dt_k]$), чтобы получить суммарную амплитуду перехода из i в f через все возможные цепочки переходов длины n , осуществлённые в произвольные моменты времени между t_0 и t :

$$\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \sum_{a_{n-1}, a_{n-2}, \dots, a_1} \frac{V_{f a_{n-1}}^{\text{B}}(t_n) dt_n}{i\hbar} \frac{V_{a_{n-1} a_{n-2}}^{\text{B}}(t_{n-1}) dt_{n-1}}{i\hbar} \dots \frac{V_{a_1 i}^{\text{B}}(t_1) dt_1}{i\hbar}.$$

Переход из i в f может осуществляться за произвольное число шагов, так что по числу шагов следует просуммировать. При этом надо учесть амплитуду перехода из i в f за нуль шагов: $\langle f | i \rangle$ — это амплитуда вероятности того, что системы в состоянии i будет обнаружена в состоянии f (без какого-либо воздействия, кроме измерения).

Просуммировав по числу шагов, за которые происходит переход из i в f мы получаем формулу (2.27). Смысл этой формулы с точки зрения амплитуд вероятности теперь ясен: переход из i в f происходит через все возможные промежуточные состояния во все возможные моменты времени.

Глава 3

Нестационарная теория возмущений

3.1 Задача нестационарной теории возмущений

Гамильтониан представляется в виде суммы не зависящего от времени невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 и зависящего от времени возмущения $\hat{V}(t)$:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

Надо найти вероятность перехода между двумя различными стационарными состояниями невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 за заданный промежуток времени (t_0, t_1) .

То есть в момент времени t_0 система была в состоянии $|i\rangle$

$$\hat{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle,$$

а в момент времени t_1 измеряется находится ли система в состоянии $|f\rangle$

$$\hat{H}_0|f\rangle = E_f|f\rangle.$$

Амплитуда вероятности перехода от состояния $|i\rangle$ в момент времени t_0 в состояние $|f\rangle$ в момент времени t_1 выражается через матричный элемент оператора эволюции. При этом удобно использовать оператор эволюции в представлении взаимодействия:

$$\langle f|\hat{U}(t_1, t_0)|i\rangle = \langle f|\hat{U}_0(t_1, t_0)\hat{U}_B(t_1, t_0)|i\rangle = \langle f|e^{-i\frac{\hat{H}_0(t_1-t_0)}{\hbar}}\hat{U}_B(t_1, t_0)|i\rangle = e^{i\frac{\hat{E}_f(t_1-t_0)}{\hbar}}\langle f|\hat{U}_B(t_1, t_0)|i\rangle.$$

Оператор эволюции в представлении взаимодействия может быть разложен в ряд (как Т-экспонента) (2.25) или (2.20). Это разложение по степеням возмущения является рядом нестационарной теории возмущений для оператора эволюции:

$$\hat{U}_B(t, t_0) = \hat{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \underbrace{\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2}}_{n \text{ раз}} \underbrace{\hat{V}_B(t_n) \hat{V}_B(t_{n-1}) \dots \hat{V}_B(t_1)}_{n \text{ раз}}. \quad (3.1)$$

Матричный элемент перехода между стационарными состояниями может быть получен из (2.27):

$$\langle f|\hat{U}_B(t, t_0)|i\rangle = \delta_{fi} + \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{\int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2}}_{n \text{ раз}} \sum_{a_{n-1} \dots a_1} \underbrace{\frac{V_{fa_{n-1}}^B(t_n)}{i\hbar} \frac{V_{a_{n-1}a_{n-2}}^B(t_{n-1})}{i\hbar} \dots \frac{V_{a_1i}^B(t_1)}{i\hbar}}_{n \text{ раз}}. \quad (3.2)$$

Матричный элемент возмущения в представлении взаимодействия может быть легко переписан через матричный элемент в представлении Шрёдингера, благодаря тому, он берётся между стационарными состояниями:

$$V_{ba}^B(t) = e^{i\omega_{ba}(t-t_0)} V_{ba}(t), \quad \omega_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar}.$$

В большинстве задач нам хватит первого порядка теории возмущений (2.18):

$$\hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_B(t_1) dt_1. \quad (3.3)$$

Матричный элемент перехода между стационарными состояниями:

$$\langle f | \hat{U}_{\text{B}}^{(1)}(t, t_0) | i \rangle = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_{fi}^{\text{B}}(t_1) dt_1 = \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}(t_1 - t_0)} V_{fi}(t_1) dt_1, \quad \omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}. \quad (3.4)$$

Нас интересуют недиагональные матричные элементы, через которые мы выражаем вероятности перехода в первом порядке нестационарной теории возмущений:

$$p_{fi}^{(1)}(t, t_0) = \left| \langle f | \hat{U}_{\text{B}}^{(1)}(t, t_0) | i \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}(t_1 - t_0)} V_{fi}(t_1) dt_1 \right|^2, \quad f \neq i. \quad (3.5)$$

3.2 Включающееся и выключающееся возмущение

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \quad \hat{V}(\pm\infty) = 0$$

То есть в начале и в конце имеется независящий от времени гамильтониан, в промежуточное время включается возмущение, некоторое время возмущение «шумит», а потом выключается.

В представлении взаимодействия при выключенном возмущении векторы состояния (волновые функции) не зависят от времени, так что амплитуды перехода между состояниями можно брать между любыми моментами до включения возмущения и после его выключения. Интегрирование в формуле (3.5) можно выполнять по всей оси времени:

$$p_{fi}^{(1)}(t, t_0) = \left| \langle f | \hat{U}_{\text{B}}^{(1)}(t, t_0) | i \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{fi}(t_1 - t_0)} V_{fi}(t_1) dt_1 \right|^2, \quad f \neq i. \quad (3.6)$$

Амплитуды вероятностей перехода оказываются связанны с фурье-компонентами соответствующего матричного элемента возмущения между начальным и конечным состояниями на частоте, отвечающей разности энергий.

3.3 Включающееся и стабилизирующееся возмущение

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) &= \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \\ \hat{V}(-\infty) &= 0, \quad \frac{\partial \hat{V}(\pm\infty)}{\partial t} = 0. \end{aligned}$$

То есть в начале имеется независящий от времени гамильтониан \hat{H}_0 , а в конце имеется другой независящий от времени гамильтониан $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{V}(\pm\infty)$, в промежуточное время имеет место некоторый переходный процесс, после окончания которого мы измеряем, в каком состоянии оказалась система.

Предполагается, что для конечного гамильтониана $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{V}(\pm\infty)$ применима стационарная теория возмущений, в частности уровни гамильтонианов \hat{H}_0 и \hat{H}_1 нумеруются одинаково. Таким образом, в отличие от параграфа 3.2 мы имеем дело с двумя разными базисами стационарных состояний, номера стационарных состояний мы будем различать приписывая к ним номер гамильтониана:

$$\hat{H}_0 |a_0\rangle = E_{a_0} |a_0\rangle, \quad \hat{H}_1 |a_1\rangle = E_{a_1} |a_1\rangle.$$

Начальное состояние относится к исходному базису

$$|i\rangle = |i_0\rangle,$$

тогда как конечное — к базису конечного гамильтониана

$$|f\rangle = |f_1\rangle.$$

С точностью до линейного порядка теории стационарной возмущений (1.35) получаем

$$|f_1^r\rangle = |f_0^r\rangle + \sum_{a \neq f} \frac{V_{af}(\pm\infty) |a_0^r\rangle}{E_{f_0} - E_{a_0}}.$$

Здесь векторы состояния не зависят от времени, т. е. используется представление Гайзенберга.

В представлении взаимодействия при выключенном возмущении векторы состояния (волновые функции) не зависят от времени, что «выключает» эволюцию до начала переходного процесса, поэтому состояние $|i\rangle = |i_0^B\rangle$ от времени не зависит. После окончания переходного процесса гамильтониан снова не зависит от времени, но это уже другой гамильтониан и состояние $|f\rangle = |f_1^B\rangle$ от времени уже зависит.

(*) Вместо состояние в представлении взаимодействия $|f_1^B\rangle$, соответствующего возмущению $\hat{V}(t)$ мы используем представление взаимодействия со штрихом $|f_1^{B'}\rangle$, соответствующее независящему от времени возмущению $\hat{V}(+\infty)$.

$$\begin{aligned}
|f_1^{B'}(t)\rangle &= \hat{U}_0^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) |f_1^B\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0(t-t_0)}{\hbar}} e^{-i\frac{\hat{H}_1(t-t_0)}{\hbar}} |f_1^B\rangle = e^{i\frac{\hat{H}_0(t-t_0)}{\hbar}} e^{-i\frac{E_{f_1}(t-t_0)}{\hbar}} |f_1^B\rangle = \\
&= e^{-i\frac{E_{f_1}(t-t_0)}{\hbar}} e^{i\frac{\hat{H}_0(t-t_0)}{\hbar}} \left(|f_0^B\rangle + \sum_{a \neq f} \frac{V_{mf}(+\infty) |a_0^B\rangle}{E_{f_0} - E_{a_0}} \right) = \\
&= e^{-i\frac{E_{f_1}(t-t_0)}{\hbar}} \left(e^{i\frac{E_{f_0}(t-t_0)}{\hbar}} |f_0^B\rangle + \sum_{a \neq f} \frac{V_{af}(+\infty) e^{i\frac{E_{a_0}(t-t_0)}{\hbar}} |a_0^B\rangle}{E_{f_0} - E_{a_0}} \right) = \\
&= e^{-i\frac{(E_{f_1} - E_{f_0})(t-t_0)}{\hbar}} \left(|f_0^B\rangle + \sum_{a \neq f} \frac{V_{af}(+\infty) e^{-i\omega_{fa}(t-t_0)} |a_0^B\rangle}{E_{f_0} - E_{a_0}} \right).
\end{aligned}$$

Далее мы откинем фазовый множитель $e^{-i\frac{(E_{f_1} - E_{f_0})(t-t_0)}{\hbar}} = e^{-i\frac{V_{ff}(t-t_0)}{\hbar}}$, поскольку на вероятность перехода он не влияет.

Выпишем амплитуду перехода удерживая члены линейного порядка по возмущению

$$\begin{aligned}
\langle f_1 | \hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) | i_0 \rangle &= \underbrace{\left(\langle f_0^B | + \sum_{a \neq f} \frac{V_{fa}(+\infty) e^{i\omega_{fa}(t-t_0)} \langle a_0^B |}{E_{f_0} - E_{a_0}} \right)}_{\langle f_1 |} \underbrace{\left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{V}_B(t_1) dt_1 \right)}_{\hat{U}_B^{(1)}(t, t_0)} | i_0 \rangle = \\
&= \underbrace{\langle f_0^B | i_0 \rangle}_0 + \sum_{a \neq f} \frac{V_{af}(+\infty) e^{i\omega_{fa}(t-t_0)}}{E_{f_0} - E_{a_0}} \underbrace{\langle a_0^B | i_0 \rangle}_{\delta_{ai}} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \underbrace{\langle f_0^B | \hat{V}_B(t_1) | i_0 \rangle}_{e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} V_{fi}(t_1)} dt_1 = \\
&= \frac{V_{fa}(+\infty) e^{i\omega_{fa}(t-t_0)}}{E_{f_0} - E_{i_0}} - \underbrace{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} V_{fi}(t_1) dt}_{\text{по частям}} = \\
&= \underbrace{\frac{V_{fa}(+\infty) e^{i\omega_{fa}(t-t_0)}}{\hbar \omega_{fi}} - \frac{e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} V_{fi}(t_1)}{\hbar \omega_{fi}} \Big|_{t_0}^t}_{0} + \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int_{t_0}^t e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} \frac{\partial V_{fi}(t_1)}{\partial t_1} dt_1.
\end{aligned}$$

На последнем шаге мы считали, что $\hat{V}(t_0) = \hat{V}(-\infty) = 0$, $\hat{V}(t) = \hat{V}(+\infty)$, при этом граничный член при интегрировании по частям в точности скомпенсировался с членом $\langle f_1 | i_0 \rangle$, появляющимся из-за неортогональности начального и конечного состояний.

Амплитуда вероятности перехода принимает вид

$$\langle f_1 | \hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) | i_0 \rangle = \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} \frac{\partial V_{fi}(t_1)}{\partial t_1} dt_1. \quad (3.7)$$

Она получается из амплитуды перехода для возмущения действующего ограниченное время (3.4) интегрированием по частям и отбрасыванием граничного члена.

Вероятность перехода в первом порядке теории возмущений:

$$p_{fi}^{(1)} = \left| \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{fi}(t_1-t_0)} \frac{\partial V_{fi}(t_1)}{\partial t_1} dt_1 \right|^2, \quad f \neq i. \quad (3.8)$$

(!) Полученная формула (3.8) работает и в описанном выше случае $\hat{V}(\pm\infty)$, т. е. она обобщает формулу (3.6).

3.3.1 Мгновенное изменение гамильтониана

Пусть возмущение пропорционально тета-функции от времени

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V} \cdot \theta(t).$$

В этом случае гамильтониан в момент времени $t = 0$ мгновенно переключается с одного независящего от времени оператора \hat{H}_0 на другой независящий от времени оператор $\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + \hat{V}$.

Если мы знаем собственные функции операторов \hat{H}_0 и \hat{H}_1 , то вероятности перехода между стационарными состояниями находятся без использования теории возмущений через определению амплитуды вероятности как коэффициента разложения вектора состояния:

$$p_{fi} = |\langle f|i \rangle|^2, \quad \hat{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle, \quad \hat{H}_1|f\rangle = E_f|f\rangle, \quad \langle i|i \rangle = \langle f|f \rangle = 1.$$

Это точная формула для перехода при мгновенном изменении гамильтониана.

Что же даёт нам в этом случае нестационарная теория возмущений?

$$\begin{aligned} \langle f_1 | \hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) | i_0 \rangle &= \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{fi}(t_1 - t_0)} \frac{\partial V_{fi} \theta(t_1)}{\partial t_1} dt_1 = \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_{fi}(t_1 - t_0)} V_{fi} \delta(t_1) dt_1 = \\ &= e^{-i\omega_{fi}t_0} \frac{V_{fi}}{\hbar \omega_{fi}} = e^{-i\omega_{fi}t_0} \frac{V_{fi}}{E_f - E_i} = e^{-i\omega_{fi}t_0} \underbrace{\left(\langle f_0 | + \sum_{a \neq f} \frac{V_{fa} \langle a_0 |}{E_{f_0} - E_{a_0}} \right)}_{\langle f_1 |} |i_0 \rangle. \end{aligned}$$

Получаем (с точностью до фазового множителя, связанного с произвольностью выбора начального момента времени) ту же самую амплитуду вероятности $\langle f|i \rangle$, только для конечного состояния взятого в линейном порядке теории возмущений.

В задаче о переходе при мгновенном изменении гамильтониана стационарная и нестационарная теория возмущений позволяют получить один и тот же приближённый ответ.

3.3.2 Адиабатическое изменение гамильтониана

Мы рассмотрели случай мгновенного изменения гамильтониана. Противоположный предельный случай — асимптотически медленное изменение гамильтониана.

Пусть матричный элемент, отвечающий за переход k раз непрерывно дифференцируемая функция времени $V_{fi}(t) \in C^k(\mathbb{R})$. Соответственно $\frac{\partial V_{fi}(t)}{\partial t} \in C^{k-1}(\mathbb{R})$. Тогда на больших частотах фурье-образ $\hat{F} \left[\frac{\partial V_{fi}(t)}{\partial t} \right](\omega)$ убывает на больших частотах как

$$\hat{F} \left[\frac{\partial V_{fi}(t)}{\partial t} \right](\omega) = O \left(\frac{1}{|\omega|^{k-1}} \right),$$

а амплитуда вероятности перехода (3.7) убывает как

$$\langle f_1 | \hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) | i_0 \rangle = O \left(\frac{1}{|\omega_{fi}|^k} \right).$$

Пусть $V_{fi}(t) = v(t/\tau)$, где τ — характерное время переходного процесса (характерное время изменения функции $V_{fi}(t)$), тогда

$$\hat{F} \left[\frac{\partial V_{fi}(t)}{\partial t} \right](\omega) = \hat{F} \left[\frac{v'(t/\tau)}{\tau} \right](\omega) = \hat{F}[v'(\xi)](\omega\tau) = O \left(\frac{1}{|\omega\tau|^{k-1}} \right).$$

Здесь v' — производная по аргументу функции.

Для амплитуды вероятности перехода получаем

$$\langle f_1 | \hat{U}_B^{(1)}(t, t_0) | i_0 \rangle = O \left(\frac{\tau}{|\omega_{fi}\tau|^k} \right).$$

Для вероятности перехода

$$p_{fi} = O \left(\frac{\tau^2}{|\omega_{fi}\tau|^{2k}} \right).$$

Теперь можно оценить вероятность перехода при медленном изменении гамильтониана из соображений размерности:

$$p_{fi} \approx \frac{C}{|\omega_{fi}\tau|^{2(k-1)}} \left(\frac{\max_t |V_{fi}(t)|}{\hbar|\omega_{fi}|} \right)^2, \quad |\omega_{fi}\tau| \ll 1,$$

где C — безразмерная константа, зависящая от формы функции $v(t/\tau)$.

Мы видим, что по мере увеличения времени переходного процесса τ вероятность перехода между уровнями падает тем быстрее, чем более гладкая функция описывает переходный процесс.

В адиабатическом пределе $\tau \rightarrow \infty$ медленное изменение гамильтониана не вызывает переходов между уровнями.

(Ф) Вспомним, что в квазиклассическом приближении правило квантования Бора–Зоммерфельда выражается через величину, которая в классической механике была адиабатическим инвариантом, т. е. для этой величины при медленном изменении гамильтониана выполнялся приближённый закон сохранения, тем более точный, чем медленнее изменения:

$$\underbrace{\frac{1}{2\pi} \oint p(x) dx}_{\text{адиабатический инвариант}} = \hbar (n + \frac{1}{2}), \quad p(x) = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}.$$

Соответственно в квантовой механике адиабатическим инвариантом оказался номер уровня энергии n .

(Ф) Для системы невзаимодействующих частиц адиабатически медленное изменение гамильтониана не меняет их распределения по уровням энергии, а значит, остаётся неизменной энтропия системы. Как и должно быть для адиабатических процессов в термодинамике.

3.4 Периодическое возмущение и «золотое правило Ферми»

Пусть оператор возмущения гармонически колебается со временем (произвольное периодическое изменение мы можем разложить по гармоническим колебаниям в ряд Фурье):

$$\hat{V}(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t} = \hat{V}^\dagger(t).$$

Амплитуда перехода под действием такого возмущения (положим начальный момент времени $t_0 = 0$)

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{U}_B^{(1)}(t, 0) | i \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi} t_1} V_{fi}(t_1) dt_1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \left(e^{i(\omega_{fi}-\omega)t_1} F_{fi} + e^{i(\omega_{fi}+\omega)t_1} F_{if}^* \right) dt_1 = \\ &= -\frac{1}{\hbar} \left(F_{fi} \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} + F_{if}^* \frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} \right) = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left(F_{fi} e^{it(\omega_{fi}-\omega)/2} \frac{\sin[t(\omega_{fi}-\omega)/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2} + F_{if}^* e^{it(\omega_{fi}+\omega)/2} \frac{\sin[t(\omega_{fi}+\omega)/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2} \right). \end{aligned}$$

Соответствующая вероятность перехода

$$\begin{aligned} p_{fi} &= \underbrace{\frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin[t(\omega_{fi}-\omega)/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2} \right)^2}_{\text{резонанс при } \omega \approx \omega_{fi}} + \underbrace{\frac{|F_{if}|^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin[t(\omega_{fi}+\omega)/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2} \right)^2}_{\text{резонанс при } \omega \approx -\omega_{fi}} + \\ &+ \underbrace{\frac{|F_{fi}F_{if}|}{\hbar^2} 2 \cos[\omega t - \arg(F_{fi}F_{if}^*)] \frac{\sin[t(\omega_{fi}-\omega)/2]}{(\omega_{fi}-\omega)/2} \frac{\sin[t(\omega_{fi}+\omega)/2]}{(\omega_{fi}+\omega)/2}}_{\text{интерференционный член}}. \end{aligned}$$

Рассмотрим ситуацию, когда один из знаменателей много меньше другого, т. е. когда $\omega \approx \pm\omega_{fi}$, тогда интерференционным членом и одним из двух оставшихся слагаемых можно пренебречь.

При $\omega = \pm\omega_{fi}$ вероятность, создаваемая соответствующим резонансным членом растёт как t^2 . Но если усреднить вероятность по частоте ω , то, поскольку ширина резонансной области спадает как $\sim \frac{\pi}{t}$ (см. рис. 3.1), то усреднённая вероятность растёт линейно по времени, а значит можно ввести конечную вероятность перехода в единицу времени.

(!) Когда вероятность перехода следует усреднять по времени?

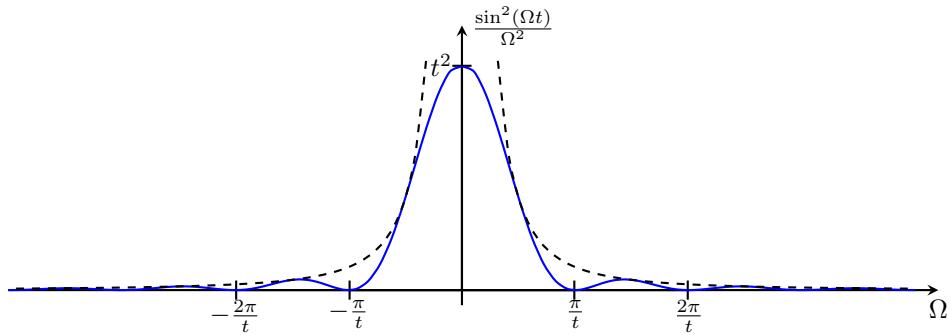


Рис. 3.1: График функции $\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2}$. Здесь $\Omega = \frac{\omega_{fi} \pm \omega}{2}$. Штриховая линия — график $\frac{1}{\Omega^2}$

- Когда от события к событию частота ω или частота ω_{fi} воспроизводятся с точностью много хуже, чем $\frac{\pi}{t}$, причём *некогерентным образом* (чтобы усреднялись вероятности, а не амплитуды)¹. Например, если мы рассматриваем переходы в атомах под действием поля лазерного излучения, усреднение по частоте может происходить за счёт теплового движения атомов (нестабильность ω_{fi} из-за эффекта Доплера), или за счёт нестабильности частоты лазера (нестабильность ω).
- Когда начальное или конечное состояние перехода принадлежит к непрерывному спектру (плотность состояний в котором слабо меняется на интервале порядка $\frac{2\pi}{t}$), а потому не фиксированы однозначно.
- Вместо непрерывного спектра подойдёт и достаточно частый дискретный спектр, если на интервале порядка $\frac{\pi}{t}$ уровни распределены достаточно равномерно.

Вероятность в единицу времени

$$w_{fi} = \frac{|F_{fi}|^2}{\hbar^2} \underbrace{t \left(\frac{\sin[t(\omega_{fi} - \omega)/2]}{t(\omega_{fi} - \omega)/2} \right)^2}_{f\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}\right)} + \frac{|F_{if}|^2}{\hbar^2} \underbrace{t \left(\frac{\sin[t(\omega_{fi} + \omega)/2]}{t(\omega_{fi} + \omega)/2} \right)^2}_{f\left(\frac{\omega_{fi} + \omega}{2}\right)}$$

Функция $f(\Omega) = \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t}$ — это пик высотой t и характерной шириной $\frac{2\pi}{t}$, с фиксированной (не зависящей от t) площадью (см. рис. 3.1). При больших временах его можно приблизить дельта-функцией.

$$\int \frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} d\Omega = \int \frac{\sin^2(\Omega t)}{(\Omega t)^2} d(\Omega t) = \pi,$$

$$\frac{\sin^2(\Omega t)}{\Omega^2 t} \approx \pi \delta(\Omega).$$

В этом приближении вероятность в единицу времени на единичный интервал энергии

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) + \frac{2\pi}{\hbar} |F_{if}|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega).$$

Мы преобразовали аргументы дельта-функций так, чтобы в дальнейшем было удобнее интегрировать по энергии.

Для определённости запишем вероятность перехода в единицу времени из дискретного спектра в непрерывный.

$$W_{fi} = \int w_{fi} \rho(E_f) dE_f = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \rho(\underbrace{E_i + \hbar\omega}_{E_f \pm \hbar\frac{\pi}{t}}) + \frac{2\pi}{\hbar} |F_{if}|^2 \rho(\underbrace{E_i - \hbar\omega}_{E_f \pm \hbar\frac{\pi}{t}}). \quad (3.9)$$

Здесь $\rho(E_f)$ — плотность конечных состояний по энергии состояний.

Мы видим, что под действием гармонического возмущения с частотой ω происходят переходы связанный с изменением энергии системы на $\pm \hbar\omega$ с точностью порядка $\pm \hbar\frac{\pi}{t}$ (величина связана с шириной пика, который мы приблизили дельта-функцией, см. рис. 3.1).

¹Если в одном событии ширина спектральной линии возмущения шире $\frac{2\pi}{t}$, то это не тот случай, т.к. тут надо складывать/усреднять не вероятности, а амплитуды вероятности).

(Ф!) То, что система получает или отдаёт при переходе ровно *один* квант энергии $\hbar\omega$ связано с тем, что мы рассмотрели *первый* порядок нестационарной теории возмущений. Как мы выяснили в § (2.4) «Т-экспонента и амплитуды вероятностей**», первый порядок разложения соответствует тому, что возмущение подействовало на систему ровно один раз и вызвало один переход. Если нас интересует процесс, в котором система поглощает или отдаёт энергию $n\hbar\omega$, то этот процесс проявится в n -ом порядке нестационарной теории возмущений.

Для возмущения, не зависящего от времени

$$\hat{V}(t) = \hat{V}.$$

из двух членов остаётся один и на место матричного элемента F_{fi} становится V_{fi}

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho\left(\underbrace{E_i}_{E_f \pm \hbar\frac{\pi}{t}}\right). \quad (3.10)$$

Для постоянного возмущения возможны переходы на уровни с той же энергией (исходный дискретный уровень должен попасть внутрь непрерывного спектра) с точностью порядка $\pm\hbar\frac{\pi}{t}$.

Формула (3.10) совпадает с полученной ранее с помощью стационарной теории возмущений формулой для времени жизни квазистационарного уровня (1.75) (с переобозначением $\gamma = W_{fi}$).

Формулы (3.9), (3.10) называют *золотым правилом Ферми*.

3.5 Соотношение неопределённостей энергия-время

Рассмотрим процесс измерения энергии квантовой системы. Взаимодействие системы с прибором должно быть мало, поэтому его обычно можно рассмотреть по теории возмущений. Прибор почти классический, так что возмущение можно рассматривать как внешнее классическое (!) поле, постоянное или (почти) периодическое. Измерение при этом проводится на протяжении конечного времени δt

Мы уже видели, что в таких условиях золотое правило Ферми (3.9), (3.10) задаёт сохранение энергии с конечной точностью

$$\delta E \cdot \delta t \sim \hbar.$$

Реальное измерение не может быть точнее, так что мы получаем соотношение неопределённостей энергия-время:

$$\delta E \cdot \delta t \gtrsim \hbar. \quad (3.11)$$

В нерелятивистской квантовой механике времени (в отличие от пространственных координат) не оператор, а параметр. Поэтому интерпретация соотношения (3.11) по аналогии с соотношениями неопределённостей для некоммутирующих операторов оказывается невозможным.

Глава 4

Сложение моментов → КПКМ-15.5

См. книгу М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику», § 15.5 «Сложение моментов» (стр. 477).

Глава 5

Специальная теория относительности в контексте квантовой механики

5.1 Обозначения, соглашения, напоминания (л)

Мы приступаем к изучению релятивистских уравнений квантовой механики: уравнения Клейна–Фока–Гордона и уравнения Дирака. Перед этим полезно вспомнить некоторые свойства специальной теории относительности (СТО) в контексте квантовой механики. Мы будем следовать соглашениям и обозначениям в книге МТП.

Скорость света c при вычислениях в СТО удобно считать равной 1. Потом, если возникнет необходимость, скорость света в правильной степени легко вставить в формулы из соображений размерности.

4-мерные объекты будут иметь ту же размерность, что одноимённые или аналогичные 3-мерные объекты, если 4-мерный объект объединяет разные 3-мерные, то выбирается размерность того 3-мерного аналога, у которого больше независимых компонент. 3-мерные объекты входят в 4-мерные объекты так, чтобы их можно было получить (хотя бы в пределе $v \ll c$) выкидыванием из 4-мерного объекта всех дополнительных компонент.

- Все 4 координаты несут верхние индексы и имеют размерность длины (как пространственные координаты), поэтому временна́я координата — $x^0 = ct$. 4 пространственно-временных координаты образуют 4-мерный радиус-вектор

$$x^i = (x^0, \underbrace{x^1, x^2, x^3}_{x^\alpha}) = (ct, \underbrace{x, y, z}_{\mathbf{r}}) = (ct, x^\alpha) = (ct, \mathbf{r}) = \underline{x}, \quad i, j = 0, 1, 2, 3, \quad \alpha, \beta = 1, 2, 3.$$

3-мерные индексы α, β, μ, ν — греческие, 4-мерные i, j, k, l — латинские.

- Метрика Минковского определяется так, что её пространственная часть совпадает с евклидовой метрикой

$$\eta_{ij} = \text{diag}(-1, +1, +1, +1) = \eta^{ij}, \quad \eta_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}.$$

Так что если мы поднимаем или опускаем пространственный (греческий) индекс то компонента тензора не меняется вне зависимости от того рассматриваем ли мы метрику Евклида или метрику Минковского.

(!!) Это отличается от выбора знаков в курсе теоретической физики Ландау и Лифшица.

- Интервал ds — аналог расстояния — имеет размерность длины.
- Собственное время $d\tau$ имеет размерность времени.

$$ds^2 = \eta_{ij} dx^i dx^j = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 = -c^2 d\tau^2.$$

- Оператор частной производной $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$ по умолчанию несёт нижний индекс, чтобы дифференциал давал правильную свёртку верхнего индекса с нижним $d\phi = dx^i \partial_i \phi$.

$$\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \underbrace{\frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}}_{\frac{\partial}{\partial x^\alpha}} \right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = (\partial_0, \underbrace{\partial_1, \partial_2, \partial_3}_{\partial_\alpha}).$$

- Оператор набла ∇_i также несёт нижний индекс. Дальше набла будет обозначать удлинённую (ковариантную) производную и будет отличаться от ∂_i .

$$\nabla_i = (\nabla_0, \underbrace{\nabla_1, \nabla_2, \nabla_3}_{\nabla}) = (\nabla_0, \nabla).$$

- 4-мерный импульс имеет размерность импульса, по умолчанию несёт нижний индекс, его временная компонента соответствует энергии со знаком минус¹:

$$p_i = \left(-\frac{\mathcal{E}}{c}, p_x, p_y, p_z \right)$$

- Скалярный квадрат 4-импульса связан с массой, что позволяет выразить энергию свободной частицы через импульс, т. е. получить функцию Гамильтона:

$$p_i p^i = \eta^{ij} p_i p_j = -p_0^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = -\left(\frac{\mathcal{E}}{c}\right)^2 + \mathbf{p}^2 = -m^2 c^2 \Rightarrow H(\mathbf{p}) = \mathcal{E} = \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2}.$$

5.2 От догадки де Бройля к уравнению Шрёдингера

С самого начала при открытии Луи де Бройлем корпускулярно-волнового дуализма использовались соображения, привлечённые из СТО. Соотношения между частотой и волновым вектором с одной стороны и энергией и импульсом с другой

$$\mathcal{E} = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

были осознаны как пропорциональность между двумя 4-мерными векторами. В ковариантных компонентах имеем

$$p_i = \left(-\frac{\mathcal{E}}{c}, \underbrace{p_x, p_y, p_z}_{\mathbf{p}} \right) = \hbar k_i = \hbar \left(-\frac{\omega}{c}, \underbrace{k_x, k_y, k_z}_{\mathbf{k}} \right).$$

При сопоставлении наблюдаемых операторов догадка де Бройля позволяет определить собственные числа и общие собственные функции для всех компонент \hat{p}_i и определить действие соответствующих операторов. Из догадки де Бройля имеем действие \hat{p}_i на фурье-гармонику (плоскую монохроматическую волну):

$$\hat{p}_i e^{ix^j k_j} = \hbar k_i e^{ix^j k_j} = -i\hbar \partial_i e^{ix^j k_j}.$$

Поскольку такие волны образуют базис, то мы получаем оператор 4-импульса как дифференциальный оператор:

$$\hat{p}_i = \left(-\frac{\hat{\mathcal{E}}}{c}, \underbrace{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z}_{\hat{\mathbf{p}}} \right) = -i\hbar \partial_i = \left(-i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \underbrace{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}}_{-i\hbar \vec{\partial}} \right).$$

Таким образом в дополнение к уже привычному выражению 3-мерного импульса через 3-мерный оператор набла получается выражение энергии через производную по времени:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \vec{\partial}, \quad \hat{\mathcal{E}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

В классической гамильтоновой механике энергия выражается через импульсы и координаты с помощью функции Гамильтона:

$$\mathcal{E} = H(x^\alpha, p_\alpha)$$

При переходе к квантовой механике заменяем энергию и импульсы операторами («надеваем шляпки») и получаем соотношение между операторами, которое вообще говоря не выполняется (производная по времени не выражается через дифференцирование по пространственным координатам):

$$\hat{\mathcal{E}} = H(x^\alpha, \hat{p}_\alpha).$$

¹Если вы любите уравнение Гамильтона–Якоби, то знаете, что $\frac{\partial S}{\partial x^\alpha} = p_\alpha$ — индекс получается нижний, как у градиента, $\frac{\partial S}{\partial t} = -\mathcal{E} = p_t \Rightarrow \frac{\partial S}{\partial ct} = -\frac{\mathcal{E}}{c}$.

Также обобщённые скорости наследуют верхний индекс у обобщённых координат: $v^i = \dot{x}^i$. Обобщённые импульсы получаются дифференцированием лагранжиана по обобщённым скоростям $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i}$ и, как и при дифференцировании по координатам, получают нижний индекс.

Из СТО вы помните, что $p^i = \left(\frac{\mathcal{E}}{c}, p_x, p_y, p_z \right)$. Опуская индекс с помощью метрики Минковского (с нашими знаками!) получаем $p_i = \left(-\frac{\mathcal{E}}{c}, p_x, p_y, p_z \right)$. Но соответствие $p_t = -\mathcal{E}$ на самом деле работает и за пределами СТО.

Подробнее и аккуратнее см. книгу МТП. Про нижние индексы у импульса см. главу 1.3 «Лагранжев формализм». Про временной импульс как минус энергию см. главы 1.9 «Время как координата и энергия как импульс» и 2.9 «Время как координата и энергия как импульс в гамильтоновом формализме».

Но мы можем выделить подпространство волновых функций, на которых это операторное равенство выполняется. Для таких функций должно выполняться условие

$$\underbrace{\hat{\mathcal{E}}}_{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}} \psi = \underbrace{H(x^\alpha, \hat{p}_\alpha)}_{\hat{H}} \psi$$

которое совпадает с временным уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi.$$

(**) В современных книгах по квантовой механике обычно стараются не рассматривать время на равных с пространственными координатами (а энергию на равных с пространственными импульсами). Это связано с тем, что нормированная волновая функция квадратично интегрируема по пространственным координатам, но не по времени:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(t, x, y, z)|^2 dx dy dz = 1,$$

$$\int_{\mathbb{R}^4} |\psi(t, x, y, z)|^2 dx dy dz dt = \int_{-\infty}^{+\infty} 1 dt = \infty.$$

Поэтому обычно в квантовой механике $\psi(t, x, y, z)$ рассматривается как $|\psi(t)\rangle$, т. е. как вектор состояния в пространстве квадратично-интегрируемых функций $L_2(\mathbb{R}^3)$ в зависимости от параметра t . Рассмотрение всех аргументов волновой функции $\psi(t, x, y, z)$ на равных предполагает, что t, x, y, z все вместе нумеруют компоненты вектора состояния, т. е. имеется один вектор состояния для всех моментов времени (в пространство $L_2(\mathbb{R}^4)$ этот вектор не попадает, т.к. функция $\psi(t, x, y, z)$ в \mathbb{R}^4 квадратично не интегрируема).

5.3 Ковариантные производные

В гамильтоновой механике взаимодействие частицы с зарядом q с внешним электромагнитным полем можно ввести сделав замену

$$p_i = \left(-\frac{\mathcal{E}}{c}, \underbrace{p_x, p_y, p_z}_{\mathbf{p}} \right) \rightarrow \mathcal{P}_i = (\mathcal{P}_0, \mathcal{P}) := P_i - \frac{q}{c} A_i. \quad (5.1)$$

(О) Импульсы \mathcal{P}_i называются *удлинёнными импульсами*.

Здесь P_i — обобщённый импульс². p_i тоже обобщённый импульс, но в отсутствие электромагнитного поля.

$$P_i = \left(-\frac{\mathcal{E}}{c}, \underbrace{P_x, P_y, P_z}_{\mathbf{P}} \right).$$

Поле A_i — 4-мерный ковекторный потенциал (подобно импульсам потенциал удобнее рассматривать с нижним индексом):

$$A_i = (-\varphi, \underbrace{A_x, A_y, A_z}_{\mathbf{A}}) = (-\varphi, \mathbf{A}).$$

(!!) Именно удлинённый импульс соответствует классическому кинематическому импульсу:

$$\mathcal{P}^i = \left(\frac{mc}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right) = m \frac{dx^i}{d\tau}.$$

(!!!) Зато именно обобщённый импульс является каноническим в классической гамильтоновой механике (через него обычно пишутся уравнения Гамильтона), для него пишутся канонические коммутационные соотношения в квантовой механике и он выражается через оператор частной производной:

$$\hat{P}_i = -i\hbar\partial_i, \quad [\hat{P}_i, \hat{x}^j] = -i\hbar\delta_i^j.$$

²Именно обобщённый импульс является в теоретической механике «импульсом по умолчанию». В частности временная компонента именно обобщённого импульса связана с гамильтонианом: $P_0 = -\frac{1}{c}H$.

Функция Гамильтона в присутствии электромагнитного поля $H(x^\alpha, P_\alpha)$ получается из функции Гамильтона без электромагнитного поля $H_0(x^\alpha, p_\alpha)$ так:

$$-\frac{1}{c}H_0(x^\alpha, p_\alpha) = p_0 \quad \rightarrow \quad -\frac{1}{c}H_0(x^\alpha, P_\alpha - \frac{q}{c}A_\alpha) = \underbrace{P_0}_{-\frac{1}{c}H} - \frac{q}{c} \underbrace{A_0}_\varphi.$$

Отсюда получаем

$$H(x^\alpha, P_\alpha) = H_0(x^\alpha, P_\alpha - \frac{q}{c}A_\alpha(t, x)) + q\varphi(t, x).$$

В частности для нерелятивистской частицы

$$H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \quad \rightarrow \quad H(\mathbf{r}, \mathbf{P}) = \frac{(\mathbf{P} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(t, \mathbf{r}))^2}{2m} + q\varphi(t, \mathbf{r}),$$

а для релятивистской частицы

$$H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \sqrt{m^2c^4 + c^2\mathbf{p}^2} \quad \rightarrow \quad H(\mathbf{r}, \mathbf{P}) = \sqrt{m^2c^4 + c^2(\mathbf{P} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(t, \mathbf{r}))^2} + q\varphi(t, \mathbf{r}).$$

В квантовой теории взаимодействие с электромагнитным полем вводится с помощью той же подстановки (5.1) с точностью до шляпок:

$$\hat{p}_i = \left(-\frac{\dot{\mathcal{E}}}{c}, \underbrace{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z}_{\hat{\mathbf{p}}} \right) \rightarrow \hat{\mathcal{P}}_i := \hat{P}_i - \frac{q}{c}A_i. \quad (5.2)$$

(!!!) Именно обобщённые импульсы в квантовой механики превращаются в дифференциальные операторы вида $-i\hbar\partial_i$.

Перепишем подстановку (5.2) через операторы дифференцирования (поделим все операторы на $-i\hbar$):

$$\partial_i = (\partial_0, \underbrace{\partial_x, \partial_y, \partial_z}_{\vec{\partial}}) \rightarrow \nabla_i = (\nabla_0, \nabla) := \partial_i - i\frac{q}{c\hbar}A_i = \underbrace{\left(\frac{1}{c}\partial_t + i\frac{q}{c\hbar}\varphi, \vec{\partial} \right)}_{\nabla_0 = \frac{1}{c}\nabla_t} - i\frac{q}{c\hbar}\mathbf{A}. \quad (5.3)$$

(О) Мы определили *ковариантную* (или *удлинённую*) *производную*, которую обозначили символом набла ∇_i .

Чтобы ввести взаимодействие с электромагнитным полем мы заменяем простые производные на ковариантные, или *удлиняем производные*.

(**) На первый взгляд может показаться, что для ковариантной производной не выполняется правило Лейбница для дифференцирования произведения. Чтобы правило Лейбница для ковариантной производной выполнялось, надо *каждому полю* *приписать* электрический заряд, и складывать заряды при умножении функций:

$$\nabla_i(\phi_1\phi_2) = \partial_i(\phi_1\phi_2) - i\frac{q_1+q_2}{c\hbar}A_i(\phi_1\phi_2) = \underbrace{[\partial_i\phi_1 - i\frac{q_1}{c\hbar}A_i\phi_1]}_{\nabla_i\phi_1}\phi_2 + \phi_1\underbrace{[\partial_i\phi_2 - i\frac{q_2}{c\hbar}A_i\phi_2]}_{\nabla_i\phi_2}. \quad (5.4)$$

При комплексном сопряжении поля заряд поля меняет знак:

$$\nabla_i\phi = \partial_i\phi - i\frac{q}{c\hbar}A_i\phi, \quad \Rightarrow \quad \nabla_i\phi^* = \partial_i\phi^* + i\frac{q}{c\hbar}A_i\phi^*.$$

Для вещественного поля заряд равен нулю и ковариантная производная совпадает с обычной³. Потенциалы A_i вещественны, а значит им соответствует нулевой заряд.

Ковариантные производные по разным координатам, в отличие от обычных частных производных не коммутируют между собой. Их коммутатор пропорционален тензору электромагнитного поля F_{ij} (5.9):

$$[\nabla_i, \nabla_j] = [\partial_i - i\frac{q}{c\hbar}A_i(\underline{x}), \partial_j - i\frac{q}{c\hbar}A_j(\underline{x})] = [\partial_i, -i\frac{q}{c\hbar}A_j(\underline{x})] + [-i\frac{q}{c\hbar}A_i(\underline{x}), \partial_j] = -i\frac{q}{c\hbar} \underbrace{(\partial_i A_j - \partial_j A_i)}_{F_{ij}} = -i\frac{q}{c\hbar} F_{ij}. \quad (5.5)$$

То же коммутационное соотношение можно переписать через удлинённые импульсы

$$[\hat{\mathcal{P}}_i, \hat{\mathcal{P}}_j] = i\frac{q\hbar}{c} F_{ij}. \quad (5.6)$$

³Термин «вещественное поле» здесь означает, что область определения соответствующей функции лежит в множестве вещественных чисел и такую функцию нельзя умножить на фазовый множитель. Комплексное поле в какой-то конфигурации может принимать только вещественные значения, но вещественным оно от этого не станет, так как его всё равно можно умножить на фазовый множитель.

5.4 Калибровочные преобразования

Пусть имеется комплексное поле $\psi(\underline{x})$, уравнение которого является линейным однородным (нас интересуют уравнения Шрёдингера, Клейна–Фока–Гордона и Дирака). Например, это поле может быть волновой функцией.

(О) *Глобальное калибровочное преобразование* — это умножение комплексного поля $\psi(\underline{x})$ на постоянный («глобальный») фазовый множитель $e^{i\alpha}$ ($\alpha = \text{const} \in \mathbb{R}$).

При глобальном калибровочном преобразовании поле и все его производные умножаются на один и тот же фазовый множитель. Если уравнение поля линейное однородное, то фазовый множитель выносится за скобки и решения уравнения переходят в решения. Глобальное калибровочное преобразование является симметрией теории. Причём никакие измеримые на эксперименте величины при таком преобразовании не меняются, таким образом глобальное калибровочное преобразования связывает между собой разные описания одного и того же состояния поля (в отличие от, например, координатного сдвига, который связывает между собой разные состояния поля).

(О) *Локальное калибровочное преобразование* — это умножение комплексного поля $\psi(\underline{x})$ на переменный («локальный») фазовый множитель $e^{i\alpha(\underline{x})}$ (α — гладкая вещественная функция от точки $\underline{x} \in \mathbb{R}^4$).

Поле и его частные производные при локальном калибровочном преобразовании изменяются по-разному:

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{i\alpha} \psi, \quad \partial_i \psi \rightarrow \partial_i (e^{i\alpha} \psi) = e^{i\alpha} \underbrace{(\partial_i \psi + i(\partial_i \alpha) \psi)}_{\text{похоже на ковариантную производную}}.$$

Поскольку после вынесения за скобки фазового множителя осталось выражение, похожее на ковариантную производную, посмотрим как будет преобразовываться ковариантная производная:

$$\begin{aligned} \nabla_i \psi &\rightarrow \nabla'_i \psi' = \nabla'_i (e^{i\alpha} \psi) = \partial_i (e^{i\alpha} \psi) - i \frac{q}{c\hbar} A'_i e^{i\alpha} \psi \\ \nabla'_i \psi' &= e^{i\alpha} (\partial_i \psi + i(\partial_i \alpha) \psi - i \frac{q}{c\hbar} A'_i \psi) = e^{i\alpha} \underbrace{(\partial_i \psi - i \frac{q}{c\hbar} [A'_i - \frac{c\hbar}{q} \partial_i \alpha] \psi)}_{A_i}. \end{aligned}$$

Мы видим, что если одновременно с полем ψ преобразовать ковекторный потенциал A_i , то ковариантная производная при калибровочном преобразовании также будет умножаться на фазовый множитель:

$$\begin{aligned} \psi(\underline{x}) &\rightarrow \psi'(\underline{x}) = e^{i\alpha(\underline{x})} \psi(\underline{x}), \\ A_i(\underline{x}) &\rightarrow A'_i = A_i(\underline{x}) + \frac{c\hbar}{q} \partial_i \alpha(\underline{x}), \\ \nabla_i \psi(\underline{x}) &\rightarrow \nabla'_i \psi'(\underline{x}) = e^{i\alpha(\underline{x})} \nabla_i \psi(\underline{x}). \end{aligned}$$

Если уравнение поля является линейным однородным, причём все производные в нём ковариантные (в таком виде можно записать уравнения Шрёдингера, Паули, Клейна–Фока–Гордона и Дирака для заряженной частицы в электромагнитном поле), то при калибровочном преобразовании оно умножается на фазовый множитель $e^{i\alpha(\underline{x})}$. При этом решение уравнения переходит в решение.

Полученное преобразование ковекторного потенциала уже знакомо нам из классической электродинамики, где оно называется калибровочным (*градиентным*) преобразованием:

$$A_i(\underline{x}) \rightarrow A'_i(\underline{x}) = A_i(\underline{x}) + \partial_i f(\underline{x}). \quad (5.7)$$

Или в трёхмерных обозначениях

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}'(t, \mathbf{r}) = \mathbf{A}(t, \mathbf{r}) + \vec{\partial} f(t, \mathbf{r}), \quad \varphi(t, \mathbf{r}) \rightarrow \varphi'(t, \mathbf{r}) = \varphi(t, \mathbf{r}) - \frac{1}{c} \partial_t f(t, \mathbf{r}). \quad (5.8)$$

В нашем случае

$$f(\underline{x}) = \frac{c\hbar}{q} \alpha(\underline{x}).$$

При калибровочном преобразовании изменяются потенциалы, а само электромагнитное поле остаётся неизменным.

Тензор электромагнитного поля:

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i = \partial_i A'_j - \partial_j A' = \begin{pmatrix} 0 & -E_x & -E_y & -E_z \\ E_x & 0 & B_z & -B_y \\ E_y & -B_z & 0 & B_x \\ E_z & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

В трёхмерных обозначениях

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = \text{rot } \mathbf{A}', \quad \mathbf{E} = -\vec{\partial} \varphi - \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A} = -\vec{\partial} \varphi' - \frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A}'.$$

Глава 6

Уравнение Клейна–Фока–Гордона

6.1 Свободное уравнение Клейна–Фока–Гордона

Энергия классической свободной релятивистской частицы имеет вид

$$\mathcal{E} = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2}.$$

Мы можем сопоставить этому уравнению уравнение Шрёдингера стандартным образом, сделав замену $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\partial}$, $\mathcal{E} \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ и домножить получившееся равенство справа на волновую функцию:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \underbrace{\sqrt{m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \Delta}}_{\hat{H}} \psi. \quad (6.1)$$

В принципе квадратный корень из дифференциального оператора даже можно извлечь¹ (такой корень удобнее извлекать в импульсном представлении), но лучше от корня избавиться возведя исходное выражение в квадрат

$$\mathcal{E}^2 = m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2.$$

После этого сделав ту же подстановку и снова домножить получившееся равенство справа на волновую функцию:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = (m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \Delta) \phi.$$

(О) Получившееся уравнение называется *свободным уравнением Клейна–Фока–Гордона*² (далее уравнение КФГ).

(Ф) В уравнении КФГ не случайно вместо волновой функции ψ появилось поле ϕ . Как мы увидим далее, это поле не может быть проинтерпретировано как волновая функция. Тем не менее, поле ϕ может рассматриваться почти как настоящая волновая функция до тех пор, пока энергии рассматриваемых процессов малы по сравнению с mc^2 . Последовательное рассмотрение уравнения КФГ производится в квантовой теории поля, в которой само поле ϕ становится оператором.

Уравнение КФГ удобно переписать в релятивистски-инвариантном виде через волновой оператор

$$(m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \square) \phi = 0, \quad \square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}. \quad (6.2)$$

¹Если энергии не слишком велики по сравнению с mc^2 , то корень можно разложить в ряд

$$\sqrt{m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \Delta} = mc^2 \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{m^2 c^2} \Delta} \approx \underbrace{mc^2}_{\text{const}} - \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \Delta}_{\mathcal{E}_{\text{кин.непрелят.}}} + \underbrace{\frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} \Delta^2}_{\text{релятив.поправка}}$$

получив малую релятивистскую поправку к оператору нерелятивистской кинетической энергии частицы.

²Это уравнение было получено Шрёдингером ещё до уравнения Шрёдингера, но из уравнения Клейна–Фока–Гордона получился неправильный спектр атома водорода, поэтому Шрёдингер не стал его публиковать.

6.2 Уравнение непрерывности для уравнения КФГ

6.2.1 Вспоминаем уравнение непрерывности для уравнения Шрёдингера

Напомним как получить уравнение непрерывности для обычного уравнения Шрёдингера

$$\partial_t \psi = \frac{1}{i\hbar} \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\partial}^2 + U(\mathbf{r}) \right)}_{\hat{H}} \psi.$$

Уравнение домножается на ψ^* и добавляется комплексно-сопряжённое выражение

$$\psi^* \partial_t \psi + \psi \partial_t \psi^* = \psi^* \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi + \psi \frac{1}{-i\hbar} (\hat{H} \psi)^*.$$

В получившемся выражении выделяются производная по времени и дивергенция:

$$\partial_t (\underbrace{\psi^* \psi}_{\rho}) = \psi^* \frac{i\hbar}{2m} \vec{\partial}^2 \psi - \psi \frac{i\hbar}{2m} \vec{\partial}^2 \psi^* = -\vec{\partial} \underbrace{\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\partial} \psi - \psi \vec{\partial} \psi^*)}_{\mathbf{j}}.$$

Получается уравнение непрерывности

$$\partial_t \rho + \vec{\partial} \mathbf{j} = 0,$$

в котором плотность вероятности и плотность потока вероятности имеют вид

$$\rho(t, \mathbf{r}) = \psi^*(t, \mathbf{r}) \psi(t, \mathbf{r}), \quad \mathbf{j}(t, \mathbf{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\partial} \psi - \psi \vec{\partial} \psi^*) = \frac{\psi^* (\hat{\mathbf{p}} \psi) + \psi (\hat{\mathbf{p}} \psi)^*}{2m} = \frac{1}{m} \operatorname{Re} (\psi^* \hat{\mathbf{p}} \psi).$$

6.2.2 Вывод уравнения непрерывности для КФГ

Уравнение непрерывности для КФГ выведем аналогично вышеизложенному. Выпишем уравнение КФГ (6.2)

$$(m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \partial_i \partial^i) \phi = 0, \quad \partial_i \partial^i = \square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}.$$

Домножим уравнение КФГ слева на ϕ^* и вычтем (чтобы, как раньше, вторые производные входили с разными знаками) комплексно-сопряжённое выражение:

$$\phi^* (m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \partial_i \partial^i) \phi - \phi (m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \partial_i \partial^i) \phi^* = -c^2 \hbar^2 \phi^* \partial_i \partial^i \phi + c^2 \hbar^2 \phi \partial_i \partial^i \phi^* = -c^2 \hbar^2 \partial_i (\phi^* \partial^i \phi - \phi \partial^i \phi^*) = 0.$$

Выберем 4-мерную плотность тока

$$j^i = -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \partial^i \phi - \phi \partial^i \phi^*) = \left(\underbrace{\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \partial_0 \phi - \phi \partial_0 \phi^*)}_{c\rho}, \underbrace{\frac{-i\hbar}{2m} (\phi^* \vec{\partial} \phi - \phi \vec{\partial} \phi^*)}_{\mathbf{j}} \right).$$

Коэффициент $-\frac{i\hbar}{2m}$ обязательно должен быть мнимым, чтобы ток j^i был вещественным, а конкретное значение этого коэффициента выбрано из соответствия с уравнением Шрёдингера для пространственной плотности тока \mathbf{j} .

Видно, что ковариантные компоненты плотности тока j_i получаются из 3-мерной плотности тока j_α добавлением временной компоненты $j_0 = -j^0 = -c\rho$, которая выражается через производные $\partial_0 = \frac{1}{c} \partial_t$ также как j_α через пространственные производные ∂_α .

Таким образом, по сравнению с уравнением Шрёдингера плотность ρ поменялась, а плотность тока осталась прежней:

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\phi^* \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^*), \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \vec{\partial} \phi - \phi \vec{\partial} \phi^*).$$

$$\partial_t j^i = \partial_t \rho + \vec{\partial} \mathbf{j} = 0.$$

В уравнении КФГ в заданный момент времени поле ϕ и его временная производная $\partial_t \phi$ могут быть заданы независимо. Из-за этого плотность ρ может быть как положительной, так и отрицательной, а значит ρ больше нельзя интерпретировать как плотность вероятности, следовательно поле ϕ не может быть волновой функцией.

(***) Плотность ρ интерпретируется как плотность числа частиц, причём уравнение КФГ оказывается описывает не одну частицу, а все частицы определённого сорта, считая античастицы со знаком минус. Описание частиц оказывается неотделимым от описания античастиц, что приводит к возможности отрицательной плотности. Рассмотрение уравнения КФГ как многочастичного уравнения связано с переходом от квантовой механики к квантовой теории поля и выходит за рамки данного курса.

6.3 Уравнение КФГ в электромагнитном поле*

Чтобы вставить в уравнение взаимодействие с электромагнитным полем мы можем, как и в нерелятивистском случае, «удлинить производные». Это делается в соответствии с правилом (5.2), (5.3).

$$\hat{p}_i \rightarrow \hat{P}_i = \hat{P}_i - \frac{q}{c} A_i(\underline{x}), \quad \partial_i \rightarrow \nabla_i = \partial_i - i \frac{q}{c\hbar} A_i(\underline{x}).$$

Уравнение КФГ приобретает вид

$$(m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \nabla_i \nabla^i) \phi = 0.$$

Если раскрыть ковариантные производные уравнение КФГ в присутствии электромагнитного поля расписывается так

$$\left(m^2 c^4 - c^2 \hbar^2 \partial_i \partial^i + \left(\frac{q}{c\hbar} \right)^2 A_i A^i + i \frac{q}{c\hbar} \frac{\partial A^i}{\partial x^i} + i 2 \frac{q}{c\hbar} A^i \partial_i \right) \phi = 0.$$

Плотность тока числа частиц также получается заменой производных на ковариантные³:

$$j^i = -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla^i \phi - \phi \nabla^i \phi^*) = \underbrace{\left(\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla_0 \phi - \phi \nabla_0 \phi^*) \right)}_{c\rho} \underbrace{\left(\frac{-i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) \right)}_{\mathbf{j}}.$$

При этом полю ϕ соответствует заряд $+q$, а полю ϕ^* — заряд $-q$, так что

$$\nabla_i \phi = \partial_i \phi - i \frac{q}{c\hbar} A_i \phi, \quad \nabla_i \phi^* = \partial_i \phi^* + i \frac{q}{c\hbar} A_i \phi^*.$$

Если раскрыть ковариантные производные плотность и поток частиц⁴ в присутствии электромагнитного поля расписывается так

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{i\hbar}{2mc} (\phi^* \nabla_0 \phi - \phi \nabla_0 \phi^*) = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\phi^* \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^*) + \frac{q}{mc^2} \phi^* \phi \underbrace{A_0}_{-\varphi}, \\ \mathbf{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) = -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \vec{\partial} \phi - \phi \vec{\partial} \phi^*) - \frac{q}{mc} \phi^* \phi \mathbf{A}. \end{aligned}$$

В уравнении непрерывности тоже можно поставить ковариантные производные, но плотность тока j^i вещественна, а значит ей приписывается заряд нуль и ковариантная производная не отличается от обычной:

$$\underbrace{\nabla_i}_{\partial_i} j^i = \underbrace{\nabla_t}_{\partial_t} \rho + \underbrace{\nabla}_{\vec{\partial}} \mathbf{j} = 0.$$

Всё, что было сказано в § 5.4 про калибровочные преобразования полностью применимо к уравнению КФГ в присутствии электромагнитного поля.

³Вывод полностью аналогичен с учётом того, что для ковариантной производной работает правило Лейбница.

⁴Если нужны плотность и поток заряда, то данные выражения надо умножить на q .

Глава 7

Уравнение Дирака

7.1 Свободное уравнение Дирака

Уравнение Шрёдингера линейно по временнй производной, т. е., с учётом соответствия $\mathcal{E} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, оно линейно по энергии. Если мы хотим релятивистски инвариантное уравнение Шрёдингера, в которое энергия и импульс (в соответствии со специальной теорией относительности) входят равноправно, то нужно придумать гамильтониан линейный по импульсу, т. е. надо всё же извлечь квадратный корень в уравнении (6.1), причём получившееся выражение должно быть линейно по импульсу:

$$\hat{H}_D = \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \hat{\mathbf{p}}^2} = mc^2 \hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \mathbf{p}) = mc^2 \hat{\beta} + c\hat{\alpha}_x \hat{p}_x + c\hat{\alpha}_y \hat{p}_y + c\hat{\alpha}_z \hat{p}_z.$$

Конечно, $\hat{\alpha} = (\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z)$ не может быть обычным (с числовыми компонентами) вектором, а $\hat{\beta}$ не может быть числом. Но Дирак догадался искать коэффициенты $\hat{\alpha}_x, \hat{\alpha}_y, \hat{\alpha}_z, \hat{\beta}$ в виде не чисел, а операторов (матриц).

В силу однородности пространства (чтобы для свободной частицы сохранялся импульс) коэффициенты α_μ, β не должны зависеть от пространственных координат, а значит они коммутируют с импульсом. Аналогично в силу однородности времени (чтобы для свободной частицы сохранялась энергия) эти коэффициенты не должны зависеть от времени.

Найдём условия, которым должны удовлетворять коэффициенты $\hat{\alpha}_\mu, \hat{\beta}$ (индексы $\mu, \nu = 1, 2, 3$ нумеруют пространственные компоненты векторов¹):

$$\begin{aligned} \hat{H}_D^2 = m^2 c^4 + c^2 \hat{\mathbf{p}}^2 &= \left(mc^2 \hat{\beta} + c\hat{\alpha}_\mu \hat{p}_\mu \right) \left(mc^2 \hat{\beta} + c\hat{\alpha}_\nu \hat{p}_\nu \right) = \\ &= m^2 c^4 \underbrace{\hat{\beta}^2}_{\hat{1}} + mc^3 \underbrace{(\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu + \hat{\alpha}_\mu \hat{\beta}) p_\mu}_{0} + c^2 \underbrace{\frac{\hat{\alpha}_\mu \hat{\alpha}_\nu + \hat{\alpha}_\nu \hat{\alpha}_\mu}{2}}_{\hat{1} \delta_{\mu\nu}} \hat{p}_\mu \hat{p}_\nu. \end{aligned}$$

(О) Чтобы записать получившиеся соотношения удобно использовать *антикоммутатор*:

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}. \quad (7.1)$$

Антикоммутационные соотношения для коэффициентов $\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu$ имеют вид

$$\begin{aligned} [\hat{\beta}, \hat{\beta}]_+ &= 2\hat{1}, \\ [\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu]_+ &= 0, \\ [\hat{\alpha}_\mu, \hat{\alpha}_\nu]_+ &= 2\hat{1}\delta_{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Таким образом, все четыре коэффициента в квадрате дают единичный оператор и антикоммутируют друг с другом.

Подберём подходящие матрицы $\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu$. В силу эрмитовости гамильтониана все эти матрицы также эрмитовы. Поскольку $\hat{\beta}^{-1} = \hat{\beta} = \hat{\beta}^\dagger$, $\hat{\alpha}_\mu^{-1} = \hat{\alpha}_\mu = \hat{\alpha}_\mu^\dagger$ эти матрицы одновременно являются унитарными, а все собственные числа этих матриц равны ± 1 .

Можно легко показать, что след этих матриц равен нулю:

$$\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu = -\hat{\alpha}_\mu\hat{\beta} \Rightarrow \hat{\beta}^2\hat{\alpha}_\mu = \hat{\alpha}_\mu = -\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu\hat{\beta} \Rightarrow \text{tr } \hat{\alpha}_\mu = -\text{tr}(\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu\hat{\beta}) = -\text{tr } \hat{\alpha}_\mu = 0;$$

¹По повторяющимся (в одночлене) индексам подразумевается суммирование, индексы, по которым идёт суммирование (свёртка) можно переименовывать. Тензоры и тензорные обозначения можно вспомнить по книге МТП глава 1.2 «Тензоры» и глава 1.7 «Кинематика и геометрия СТО».

$$\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu = -\hat{\alpha}_\mu\hat{\beta} \Rightarrow \hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu^2 = \hat{\beta} = -\hat{\alpha}_\mu\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu \Rightarrow \text{tr } \hat{\beta} = -\text{tr}(\hat{\alpha}_\mu\hat{\beta}\hat{\alpha}_\mu) = -\text{tr } \hat{\beta} = 0.$$

Следовательно собственные числа $+1$ и -1 у каждой матрицы должны присутствовать в равном количестве. Поскольку других собственных чисел нет, получается, что размерность матриц обязательно чётная.

Матрицы $\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu$ обязательно линейно независимы. Предположим обратное: пусть

$$\hat{\beta} = \sum_\nu c_\nu \hat{\alpha}_\nu \Rightarrow [\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu]_+ = \left[\sum_\nu c_\nu \hat{\alpha}_\nu, \hat{\alpha}_\mu \right]_+ = \sum_\nu c_\nu 2\hat{1}\delta_{\mu\nu} = 2\hat{1}c_\mu \neq 0.$$

Размер матриц 2×2 не подходит, поскольку среди эрмитовых матриц 2×2 линейное подпространство матриц с нулевым следом имеет размерность 3 (в качестве базиса могут быть выбраны матрицы Паули²).

Следовательно, матрицы $\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu$ должны иметь размерность не ниже 4. Причём эти матрицы определены с точностью до унитарного преобразования. Так что одну из них можно выбрать диагональной. Пусть это будет $\hat{\beta}$, которую возьмём в виде

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{1}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{1}_2 \end{pmatrix} = \sigma_z \otimes \hat{1}_2.$$

Здесь $\hat{1}_2$ — единичная матрица 2×2 .

Матрицы $\hat{\alpha}_\mu$ антисимметричные с $\hat{\beta}$ можно выбрать в виде $(\cos A \sigma_x + \sin A \sigma_y) \otimes \hat{c}_\mu$, причём \hat{c}_μ должны удовлетворять антисимметрическим соотношениям

$$[\hat{c}_\mu, \hat{c}_\nu]_+ = 2\hat{1}_2\delta_{\mu\nu}.$$

Простейший вариант: выбрать $A = 0$, $\hat{c}_\mu = \sigma_\mu$.

Итак, мы **постулируем**³ удовлетворяющие антисимметрическим соотношениям (7.2) матрицы:

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{1}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{1}_2 \end{pmatrix} = \sigma_z \otimes \hat{1}_2, \quad \hat{\alpha}_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x \otimes \sigma_\mu.$$

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Уравнение Дирака имеет вид обычного временного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом Дирака:

$$i\hbar\partial_t\psi = (mc^2\hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \hat{\mathbf{p}}))\psi, \quad (7.3)$$

$$i\hbar\partial_t\psi = (mc^2\hat{\beta} - i\hbar c(\hat{\alpha}, \vec{\partial}))\psi. \quad (7.4)$$

Но теперь волновая функция — столбец из 4-х строк, а сопряжённая (эрмитово) волновая функция — строка из 4-х элементов:

$$\psi(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\underline{x}) \\ \psi_2(\underline{x}) \\ \psi_3(\underline{x}) \\ \psi_4(\underline{x}) \end{pmatrix}, \quad \psi^\dagger(\underline{x}) = (\psi_1^*(\underline{x}), \psi_2^*(\underline{x}), \psi_3^*(\underline{x}), \psi_4^*(\underline{x})).$$

(!) Четыре компоненты волновой функции **не** соответствуют четырём пространственно-временным координатам! Они преобразуются по-другому и образуют не вектор, а *4-компонентный (дираковский) спинор*. Что это такое мы обсудим далее.

²На всякий случай напомним явный вид матриц Паули и формулу их умножения:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_\mu\sigma_\nu = \hat{1}_2\delta_{\mu\nu} + i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda.$$

³Все предыдущие рассуждения — наводящие соображения. В них главное, что размерность 4 минимальна.

Вместо $\rho(\underline{x}) = \psi^* \psi$ теперь надо рассматривать

$$\rho(\underline{x}) = \psi^\dagger \psi = \psi_1^* \psi_1 + \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 + \psi_4^* \psi_4 = \sum_{i=1}^4 |\psi_i|^2 \geq 0.$$

В качестве первого шага к пониманию физического смысла 4-компонентного спинора рассмотрим решения уравнения Дирака не зависящие от пространственных координат $\psi(t, x, y, z) = \psi_0(t)$ (т. е. состояния с нулевым импульсом). Для таких волновых функций стационарное уравнение Дирака (т. е. стационарное уравнение Шрёдингера для гамильтониана Дирака) имеет вид

$$mc^2 \hat{\beta} \psi_0 = E_0 \psi_0.$$

Для выбранной нами матрицы $\hat{\beta}$

$$E_{01} = E_{02} = +mc^2, \quad E_{03} = E_{04} = -mc^2; \quad (7.5)$$

$$\psi_{01} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{02} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{03} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{04} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (7.6)$$

Мы видим, что при нулевом импульсе первые две компоненты спинора соответствуют энергии $+mc^2$, т. е. энергии покоя частицы с массой m , а третья и четвёртая компоненты соответствуют отрицательной энергии $-mc^2$. При малых импульсах (в нерелятивистском случае) можно ожидать, что будут доминировать первые две компоненты спинора и мы получим двухкомпонентный спинор вместо четырёхкомпонентного. Сигма-матрицы в структуре матриц α_μ явно намекают, что две компоненты связаны со спином $\frac{1}{2}$, в чём мы убедимся далее.

7.2 Уравнение непрерывности для уравнения Дирака

Уравнение непрерывности для уравнения Дирака можно получить также как мы получали для уравнения Шрёдингера (см. 6.2.1 «Вспоминаем уравнение непрерывности для уравнения Шрёдингера») с заменой ψ^* на ψ^\dagger . Берём уравнение Дирака обычное и эрмитово сопряжённое

$$\begin{aligned} \partial_t \psi &= \frac{mc^2}{i\hbar} \hat{\beta} \psi - c(\hat{\alpha}, \vec{\partial}) \psi, \\ \partial_t \psi^\dagger &= -\frac{mc^2}{i\hbar} \psi^\dagger \hat{\beta} - c(\vec{\partial} \psi^\dagger, \hat{\alpha}). \end{aligned}$$

Во втором уравнении матрицы $\hat{\beta}, \hat{\alpha}_\mu$ действуют на строку ψ^\dagger справа, частная производная $\vec{\partial}$ по-прежнему слева.

Домножаем первое уравнение слева на ψ^\dagger , а второе справа на ψ и складываем то, что получилось

$$\psi^\dagger \partial_t \psi + (\partial_t \psi^\dagger) \psi = \psi^\dagger \frac{mc^2}{i\hbar} \hat{\beta} \psi - c \psi^\dagger (\hat{\alpha}, \vec{\partial}) \psi - \frac{mc^2}{i\hbar} \psi^\dagger \hat{\beta} \psi - c (\vec{\partial} \psi^\dagger, \hat{\alpha}) \psi$$

и получаем уравнение непрерывности

$$\partial_t \underbrace{(\psi^\dagger \psi)}_{\rho} = -\vec{\partial} \underbrace{(c \psi^\dagger \hat{\alpha} \psi)}_{\mathbf{j}}$$

и видим, что равны плотность вероятности и плотность потока вероятности

$$\rho(\underline{x}) = \psi^\dagger \psi, \quad \mathbf{j}(\underline{x}) = c \psi^\dagger \hat{\alpha} \psi. \quad (7.7)$$

Величина ρ неотрицательно, так что мы можем её интерпретировать как плотность вероятности, а функцию ψ — как волновую функцию у которой появился дополнительный дискретный аргумент, нумерующий строки дираковского спинора.

(Ф) В уравнении Дирака волновой функция ψ может рассматриваться почти как настоящая волновая функция до тех пор, пока энергии рассматриваемых процессов малы по сравнению с mc^2 . Последовательное рассмотрение уравнения Дирака производится в квантовой теории поля, в которой само поле ψ становится оператором.

7.3 Стационарные состояния для уравнения Дирака

Для гамильтониана Дирака можно поставить задачу на собственные числа и собственные функции. Поскольку гамильтониан Дирака коммутирует с компонентами импульса (в следствие того, что инвариантен относительно произвольных координатных сдвигов), можно искать стационарные состояния среди состояний с постоянным импульсом (плоских монохроматических волн).

В силу блочного вида матрица $\hat{\beta}, \alpha_\mu$ 4-компонентный спинор представим как комбинацию двух 2-компонентных:

$$\psi(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\underline{x}) \\ \psi_2(\underline{x}) \\ \psi_3(\underline{x}) \\ \psi_4(\underline{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1(\underline{x}) \\ \phi_2(\underline{x}) \end{pmatrix}, \quad \phi_1(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\underline{x}) \\ \psi_2(\underline{x}) \end{pmatrix}, \quad \phi_2(\underline{x}) = \begin{pmatrix} \psi_3(\underline{x}) \\ \psi_4(\underline{x}) \end{pmatrix}. \quad (7.8)$$

Стационарное уравнение Дирака (стационарное уравнение Шрёдингера для гамильтониана Дирака):

$$(mc^2 \hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \hat{\mathbf{p}})) \psi_E = E \psi_E.$$

Ищем собственную функцию в виде

$$\psi_E = \psi_{\mathbf{p}_0} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} e^{i \frac{\mathbf{r} \mathbf{p}_0}{\hbar}},$$

где u_1, u_2 — не зависящие от координат 2-компонентные столбцы (спиноры).

Подставляем $\psi_{\mathbf{p}_0}$ в уравнение

$$(mc^2 \hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \mathbf{p}_0)) \psi_{\mathbf{p}_0} = E_{\mathbf{p}_0} \psi_{\mathbf{p}_0}.$$

Оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$ в левой части равенства заменился на значение импульса в данном состоянии \mathbf{p}_0 . Теперь на множитель $e^{i \frac{\mathbf{r} \mathbf{p}_0}{\hbar}}$ можно сократить. Получаем

$$\begin{aligned} \left(mc^2 \begin{pmatrix} \hat{1}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{1}_2 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & (\sigma, \mathbf{p}_0) \\ (\sigma, \mathbf{p}_0) & 0 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} &= E_{\mathbf{p}_0} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}. \\ \begin{pmatrix} mc^2 \hat{1}_2 & c(\sigma, \mathbf{p}_0) \\ c(\sigma, \mathbf{p}_0) & -mc^2 \hat{1}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} &= E_{\mathbf{p}_0} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Для нахождения собственных чисел получается векторное уравнение

$$\det \begin{pmatrix} (mc^2 - E_{\mathbf{p}_0}) \hat{1}_2 & c(\sigma, \mathbf{p}_0) \\ c(\sigma, \mathbf{p}_0) & -(mc^2 + E_{\mathbf{p}_0}) \hat{1}_2 \end{pmatrix} = 0.$$

Для вычисления определителя удобно воспользоваться формулой Шура⁴

$$\begin{aligned} \det((mc^2 - E_{\mathbf{p}_0}) \hat{1}_2) \det(-(mc^2 + E_{\mathbf{p}_0}) \hat{1}_2 - c(\sigma, \mathbf{p}_0)(mc^2 - E_{\mathbf{p}_0})^{-1} \hat{1}_2 c(\sigma, \mathbf{p}_0)) &= \\ &= (mc^2 - E_{\mathbf{p}_0})^2 \left[-(mc^2 + E_{\mathbf{p}_0}) - \frac{c^2 \mathbf{p}_0^2}{mc^2 - E_{\mathbf{p}_0}} \right]^2 = \\ &= [E_{\mathbf{p}_0}^2 - (mc^2)^2 - c^2 \mathbf{p}_0^2]^2 = 0. \end{aligned}$$

Векторное уравнение имеет два двукратных корня

$$E_{\mathbf{p}_0} = \pm \sqrt{m^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}_0^2}. \quad (7.10)$$

Благодаря 2-кратному вырождению уровней при заданном ненулевом импульсе одну из двухкомпонентных амплитуд u_1, u_2 можно задать произвольно, а вторую выразить через неё. 4-компонентное уравнение

⁴Выведем формулу Шура:

$$\begin{pmatrix} \hat{A}^{-1} & 0 \\ -\hat{C} \hat{A}^{-1} & \hat{1} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix}}_M = \begin{pmatrix} \hat{1} & \hat{A}^{-1} \hat{B} \\ 0 & \hat{D} - \hat{C} \hat{A}^{-1} \hat{B} \end{pmatrix} \Rightarrow \det M = \det \hat{A} \det(\hat{D} - \hat{C} \hat{A}^{-1} \hat{B}).$$

(7.9) можно выписать как два 2-компонентных уравнения, которые при энергиях (7.10) оказываются линейно зависимы:

$$\begin{aligned} mc^2 u_1 + c(\sigma, \mathbf{p}_0) u_2 &= E_{\mathbf{p}_0} u_1, \\ c(\sigma, \mathbf{p}_0) u_1 - mc^2 u_2 &= E_{\mathbf{p}_0} u_2. \end{aligned}$$

Отсюда можно выразить u_1, u_2 друг через друга

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{c(\sigma, \mathbf{p}_0) u_2}{E_{\mathbf{p}_0} - mc^2}, \\ u_2 &= \frac{c(\sigma, \mathbf{p}_0) u_1}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2} = \frac{1}{c}(\sigma, \mathbf{v}_{\frac{1}{2}}) u_1. \end{aligned}$$

Для положительное энергии удобно представить стационарное состояние в виде

$$\psi_{\mathbf{p}_0} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \frac{1}{c}(\sigma, \mathbf{v}_{\frac{1}{2}}) u_1 \end{pmatrix} e^{i \frac{\mathbf{r} \mathbf{p}_0}{\hbar}}. \quad (7.11)$$

Здесь $\mathbf{v}_{\frac{1}{2}}$ — такая скорость, что два преобразования Лоренца с такой скоростью дадут одно преобразование Лоренца со скоростью $\mathbf{v}_{\text{кл.}} = \frac{c \mathbf{p}_0}{E_{\mathbf{p}_0}}$, соответствующей классической скорости частицы:

$$\mathbf{v}_{\frac{1}{2}} = \frac{c^2 \mathbf{p}_0}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2}.$$

При малых импульсах $\mathbf{v}_{\frac{1}{2}} \approx \frac{1}{2} \mathbf{v}_{\text{кл.}}$.

Для найденного решения плотность вероятности и плотность потока вероятности (7.7) имеют вид

$$\rho = u_1^\dagger u_1 + u_2^\dagger u_2 = u_1^\dagger u_1 + \frac{u_1^\dagger c(\sigma, \mathbf{p}_0)}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2} \frac{c(\sigma, \mathbf{p}_0) u_1}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2} = u_1^\dagger u_1 \left(1 + \frac{c^2 \mathbf{p}_0^2}{(E_{\mathbf{p}_0} + mc^2)^2} \right) = u_1^\dagger u_1 \frac{2E_{\mathbf{p}_0}}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2};$$

$$\mathbf{j} = (u_1^\dagger, u_2^\dagger) \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \left(u_1^\dagger, \frac{u_1^\dagger c(\sigma, \mathbf{p}_0)}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2} \right) \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \frac{c(\sigma, \mathbf{p}_0) u_1}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2} \end{pmatrix} = c \frac{u_1^\dagger \{ \sigma(\sigma, \mathbf{p}_0) + (\sigma, \mathbf{p}_0) \sigma \} u_1}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2}.$$

Выражение в фигурных скобках легко раскрыть через свёртки и произведения $\sigma_\mu \sigma_\nu$:

$$\sigma(\sigma, \mathbf{p}_0) + (\sigma, \mathbf{p}_0) \sigma = 2\mathbf{p}_0.$$

Получаем

$$\mathbf{j} = u_1^\dagger u_1 \frac{2c\mathbf{p}_0}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2} = \frac{c\mathbf{p}_0}{E_{\mathbf{p}_0}} \rho = \mathbf{v}_{\text{кл.}} \rho.$$

Отношение $\frac{c\mathbf{p}_0}{E_{\mathbf{p}_0}} = \mathbf{v}_{\text{кл.}}$ — это классическая (т. е. такая, как в неквантовой СТО) скорость релятивистской частицы с импульсом \mathbf{p}_0 и энергией $E_{\mathbf{p}_0}$.

7.4 Частицы и античастицы

Энергетический спектр гамильтониана Дирака для свободной частицы включает два полуинтервала $(-\infty, -mc^2]$ и $[mc^2, +\infty)$ разделённых щелью $(-mc^2, +mc^2)$. Самое неприятное с термодинамической точки зрения, что этот спектр неограничен снизу: термодинамического равновесия с таким энергетическим спектром существовать не может.

В принципе аналогичный энергетический спектр был и у классической функции Гамильтона свободной релятивистской частицы $H = \sqrt{m^2 c^4 + \mathbf{p}^2}$.

В классическом случае возможность сколь угодно больших отрицательных энергий нас не волновала, поскольку отрицательные энергии отделены от положительных щелью $(-mc^2, +mc^2)$, а энергия классической частицы может меняться только непрерывно.

В квантовом случае, провзаимодействовав с другими частицами, наша частица через щель может «перепрыгнуть», подобно тому, как квантовая частица может пророннелировать через потенциальный барьер, преодолеть который классической частице не хватило бы энергии. Частице термодинамически выгодно уходить всё ниже и ниже по энергиям, выделяя во внешнюю среду сколь угодно большую энергию. Получается некий «вечный двигатель нулевого рода», работающий за счёт нарушения нулевого начала термодинамики (постулата о существовании термодинамического равновесия).

Спасает ситуацию то, что уравнение Дирака описывает фермионы, а согласно принципу запрета Паули, в каждом состоянии число фермионов может быть либо 0, либо 1 (либо, как обычно в квантовой механике, суперпозиция 0 и 1). Дирак предложил считать, вакуум⁵ — это не отсутствие частиц, вакуум — это состояние с минимальной энергией. Тогда в вакуумном состоянии поля Дирака все состояния с отрицательной энергией заполнены (*море Дирака*), а все состояния с положительной энергией свободны. Полная энергия вакуума оказывается равна $-\infty$, но мы этим пренебрегаем: энергия определена с точностью до константы, будем отсчитывать энергию поля и другие сохраняющиеся величины от вакуума, тогда энергия, импульс, момент импульса и заряд вакуума по определению равны нулю.

Если дираковскому вакууму сообщить энергию больше, чем ширина щели $2mc^2$, то можно частицу с отрицательной энергией перевести в состояние с положительной энергией. При этом у нас будет заполнено одно состояние с положительной энергией и останется свободным одно состояние с отрицательной энергией (*дырка*). Родится *пара частица-дырка* (обратный процесс к рождению пары — *аннигиляция* пары). Если не хватает (по сравнению с вакуумным состоянием) частицы с энергией $-E$, импульсом $-\mathbf{p}$ и проекцией спина $-m_s$ и зарядом q , то такое состояние имеет энергию $+E$, импульс $+\mathbf{p}$ и проекцию спина $+m_s$ и заряд $-q$. Все эти величины мы приписываем дырке. Поскольку

$$E^2 = m^2 c^4 + \mathbf{p}^2,$$

масса дырки строго равна массе частицы.

Таким образом дырка в море Дирака ведёт себя как частица с положительной энергией $+E$ той же массы, что и частица с противоположными зарядами по отношению к частице.

дырка = античастица.

(!) Частица с отрицательной энергией античастицей не является. Античастица — это *отсутствие* частицы с отрицательной энергией.

Когда мы введём операторы рождения и уничтожения для фермионов, то окажется, что они равноправны: какой из пары операторов объявить оператором рождения, а какой — оператором уничтожения, — дело удобства. Поэтому между заполненными и незаполненными состояниями есть симметрия. Можно сказать, что рождение фермиона — это уничтожение дырки, а уничтожение фермиона — рождение дырки.

Принято считать электрон частицей, а позитрон (антиэлектрон) — античастицей. Хотя какой фермион из пары назначить частицей, а какой — античастицей, — вопрос соглашения.

(п) В физике конденсированного состояния по аналогии с квантовой теорией поля состояние с минимальной энергией называют вакуумом, на фоне которого могут возникать «электроны» и дырки. В таком «вакууме» все электронные состояния в кристалле с энергией ниже энергии Ферми заполнены, а все состояния с энергией выше энергии Ферми свободны. «Электроны» учитываются только те, которые приобрели энергию выше энергии Ферми, дырки — незаполненные электронные состояния с энергией ниже энергии Ферми. В физике твёрдого тела идеальной симметрии между электронами и дырками, как для поля Дирака, уже нет, в частности зависимости энергии от квазимпульса у них разные (а значит и массы разные), но все заряды для них по-прежнему противоположны.

7.5 Момент импульса дираковской частицы

Гамильтониан Дирака по построению (поскольку матрицы $\hat{\beta}, \alpha_\mu$ не зависят от пространственных координат) симметричен по отношению к пространственным сдвигам, что предполагает сохранение импульса. Исследуем теперь симметрию по отношению к поворотам. Для этого вычислим коммутатор гамильтониана с компонентами обезразмеренного орбитального момента $\hat{l}_\mu = \frac{1}{\hbar} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{x}_\nu \hat{p}_\lambda$.

$$[\hat{H}_D, \hat{l}_\mu] = \left[mc^2 \hat{\beta} + c(\hat{\alpha}_\kappa \hat{p}_\kappa), \frac{1}{\hbar} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{x}_\nu \hat{p}_\lambda \right] = \frac{c}{\hbar} \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{\alpha}_\kappa \underbrace{[\hat{p}_\kappa, \hat{x}_\nu]}_{-i\hbar\delta_{\kappa\nu}} \hat{p}_\lambda = -ic\epsilon_{\mu\kappa\lambda} \hat{\alpha}_\kappa \hat{p}_\lambda = -ic[\hat{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]_\mu.$$

Операторы орбитального момента являются генераторами поворотов координатной подсистемы, такие повороты вращают пространство не затрагивая компонент спинора. Как мы знаем для частиц со спином повороты также «перепутывают» спиновую волновую функцию. Поэтому попробуем найти спиновый вклад в момент импульса.

Мы уже убедились, что при нулевом импульсе две компоненты спинора соответствуют энергии $+mc^2$, а две — энергии $-mc^2$ (7.6), оператор спина не должен перепутывать эти две пары компонент между

⁵См. также КПКМ-1.1.9 «Вакуум» (стр. 19).

собой. Поэтому в вместо матриц Паули в выражении для спина $\hat{s}_\mu = \frac{1}{2}\sigma_\mu$ попробуем взять матрицы Σ_μ , которые на первую и на вторую пару компонент действуют по отдельности как матрицы Паули:

$$\Sigma_\mu = \begin{pmatrix} \sigma_\mu & 0 \\ 0 & \sigma_\mu \end{pmatrix} = \hat{1}_2 \otimes \sigma_\mu.$$

$$\Sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$[\hat{\alpha}_\mu, \Sigma_\nu] = \left[\begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_\nu & 0 \\ 0 & \sigma_\nu \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} 0 & [\sigma_\mu, \sigma_\nu] \\ [\sigma_\mu, \sigma_\nu] & 0 \end{pmatrix} = 2i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{\alpha}_\lambda, \quad [\hat{\beta}, \Sigma_\nu] = 0. \quad (7.12)$$

$$[\hat{H}_D, \frac{1}{2}\Sigma_\mu] = \left[mc^2\hat{\beta} + c(\hat{\alpha}_\lambda\hat{p}_\lambda), \frac{1}{2}\hat{\Sigma}_\mu \right] = c \underbrace{[\hat{\alpha}_\lambda, \frac{1}{2}\hat{\Sigma}_\mu]}_{i\epsilon_{\lambda\mu\kappa}\hat{\alpha}_\kappa} \hat{p}_\lambda = i\epsilon_{\mu\kappa\lambda}\hat{\alpha}_\kappa\hat{p}_\lambda = ic[\hat{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]_\mu$$

Мы видим, что половинки матриц Σ_μ удовлетворяют коммутационным соотношениям для момента импульса:

$$\hat{s}_\mu = \frac{1}{2}\Sigma_\mu, \quad [\hat{s}_\mu, \hat{s}_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{s}_\lambda.$$

Сумма квадратов компонент позволяет определить значение момента:

$$\hat{s}^2 = \frac{1}{4}(\Sigma_x^2 + \Sigma_y^2 + \Sigma_z^2) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 & 0 \\ 0 & \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3\hat{1}_2 & 0 \\ 0 & 3\hat{1}_2 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hat{1}.$$

$\frac{3}{4} = s(s+1) = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)$, так что дираковская частица имеет спин $\frac{1}{2}$.

Компоненты \hat{l}_μ и \hat{s}_ν коммутируют между собой, поскольку эти операторы действуют на разные аргументы волновой функции (\hat{l}_μ — на координаты, \hat{s}_ν — на дискретный аргумент, нумерующий строки), т. е. эти операторы относятся к разным подсистемам (координатной и спиновой)

$$[\hat{l}_\mu, \hat{s}_\nu] = 0.$$

Также мы видим, что суммы компонент орбитального момента с \hat{s}_μ также удовлетворяют коммутационным соотношениям для момента импульса:

$$\hat{j}_\mu = \hat{l}_\mu + \hat{s}_\mu, \quad [\hat{j}_\mu, \hat{j}_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{j}_\lambda.$$

Причём \hat{j}_μ коммутируют с гамильтонианом Дирака:

$$[\hat{H}_D, \hat{j}_\mu] = [\hat{H}_D, \hat{l}_\mu] + [\hat{H}_D, \hat{s}_\mu] = -ic[\hat{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]_\mu + ic[\hat{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}]_\mu = 0.$$

Итак, у нас возник вектор с эрмитовыми компонентами $\hat{\mathbf{j}}$, который коммутирует с гамильтонианом Дирака, а значит он является сохраняющейся величиной и он порождает преобразованиям симметрии. Этот вектор — сумма орбитального момента импульса с некоторой добавкой, что означает, что для дираковской частицы момент импульса кроме орбитального момента содержит ещё некоторый дополнительный вклад (спиновый момент). Таким образом $\hat{\mathbf{j}}$ — полный (орбитальный + спиновый) момент импульса частицы. Все свойства момента импульса, которые мы выводили из коммутационных соотношений справедливы для $\hat{\mathbf{j}}$.

Унитарный оператор

$$\hat{R}_{\phi\mathbf{n}} = \underbrace{e^{-i\phi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{j}})}}_{\text{поворот}} = \underbrace{e^{-i\phi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{l}})}}_{\text{координатный поворот}} \underbrace{e^{-i\phi(\mathbf{n}, \hat{\mathbf{s}})}}_{\text{спиновый поворот}}$$

— это оператор поворота на угол ϕ вокруг оси \mathbf{n} ($|\mathbf{n}| = 1$). Этот оператор разлагается на координатную часть и спиновую часть, которые коммутируют, поскольку действуют на разные переменные волновой функции.

7.6 Преобразования Лоренца*

Преобразования Лоренца должны переводить стационарные состояния с определённым импульсом (см. § 7.3) друг в друга (с точностью до множителя), при этом 4-импульсы этих состояний должны преобразовываться как 4-векторы.

Кроме того, чистые (без примеси поворотов) преобразования Лоренца (*бусты*) должны быть связаны с поворотами так, как полагается в соответствии со структурой группы Лоренца (комбинируя бусты по разным направлениям можно получить чистый поворот⁶).

Задача выглядит довольно устрашающей, но представление бустов и поворотов в экспоненциальной форме (т. е. использование математического аппарата теории групп и алгебр Ли) существенно её облегчает.

Пусть оператор активного⁷ поворота вокруг оси x^μ на угол ϕ записан в экспоненциальном виде:

$$\hat{R}_{\phi,\mu} = e^{\phi \hat{b}_\mu}.$$

Для поворота $\hat{R}_{\phi,\mathbf{n}}$ на угол ϕ вокруг оси, заданной единичным вектором \mathbf{n} , генератор получается линейной комбинацией генераторов поворотов вокруг координатных осей

$$\hat{R}_{\phi,\mathbf{n}} = e^{\phi(\hat{\mathbf{b}}, \mathbf{n})}.$$

Аналогично, пусть активный буст на быстроту⁸ ϑ вдоль оси x^μ записан как

$$\hat{\Lambda}_{\vartheta,\mu} = e^{\vartheta \hat{a}_\mu}.$$

Для буста $\hat{\Lambda}_{\vartheta,\mathbf{n}}$ с быстротой ϑ вдоль направления, заданного единичным вектором \mathbf{n} , генератор получается линейной комбинацией генераторов бустов по координатным осям

$$\hat{\Lambda}_{\vartheta,\mathbf{n}} = e^{\vartheta(\hat{\mathbf{a}}, \mathbf{n})}.$$

Чтобы найти коммутационные соотношения для генераторов поворотов и бустов воспользуемся представлением группы Лоренца как группы преобразований 4-мерных векторов (линии отделяют временные строки и столбец). Генераторы в этом представлении имеют вид⁹

$$\begin{aligned} \hat{b}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{b}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{b}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \\ \hat{a}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Легко найти соответствующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{b}_\mu, \hat{b}_\nu] = \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{b}_\lambda, \quad [\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu] = -\epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{b}_\lambda, \quad [\hat{a}_\mu, \hat{b}_\nu] = \epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{a}_\lambda, \quad (7.13)$$

Для дираковских спиноров, надо подобрать генераторы с теми же коммутационными соотношениями (7.13).

Как мы уже установили в § 7.5

$$\hat{b}_\mu = -\frac{i}{2} \Sigma_\mu.$$

Нам осталось подобрать генераторы \hat{a}_μ .

Эти матрицы не могут быть блочно-диагональны, как матрицы Σ , что видно из того, что (см. § 7.3) при нулевом импульсе стационарного состояния обязательно ϕ_1 или ϕ_2 обращается в нуль, а при ненулевом импульсе такое невозможно.

Кроме того, можно ожидать, что генераторы бустов, как и генераторы поворотов будут удобно выражаться через матрицы Паули. Естественно попробовать на эту роль матрицы \hat{a}_γ .

$$[\hat{a}_\mu, \hat{a}_\nu] = \begin{pmatrix} [\sigma_\mu, \sigma_\nu] & 0 \\ 0 & [\sigma_\mu, \sigma_\nu] \end{pmatrix} = 2i\epsilon_{\mu\nu\lambda} \Sigma_\lambda$$

⁶См. задачу 25 (§ 1.8.8) и её решение (§ 2.8.8) в книге МТП.

⁷Активное преобразование меняет физическую систему, пассивное — систему координат.

⁸По определению быстрота связана ϑ со скоростью v формулой $v = c \cdot \tanh \vartheta$. При последовательном выполнении бустов вдоль одного направления складываются не скорости, а быстроты.

⁹См. § 1.8.6 в книге МТП.

Также вспоминаем (7.12):

$$[\hat{\alpha}_\mu, \Sigma_\nu] = 2i\epsilon_{\mu\nu\lambda}\hat{\alpha}_\lambda.$$

Мы видим, что правильные коммутационные соотношения (7.13) получаются при

$$\hat{a}_\mu = \frac{1}{2}\hat{\alpha}_\mu.$$

Выпишем явно операторы преобразований Лоренца в полученном представлении:

$$\hat{\alpha}_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{\alpha}, \mathbf{n}) = \begin{pmatrix} 0 & (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \\ (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{\alpha}, \mathbf{n})^2 = \hat{1}, \quad (\hat{\alpha}, \mathbf{n})^{2k+1} = (\hat{\alpha}, \mathbf{n}), \quad (\hat{\alpha}, \mathbf{n})^{2k} = \hat{1};$$

$$\hat{\Lambda}_{\vartheta \mathbf{n}} = e^{\vartheta(\hat{\alpha}, \mathbf{n})} = e^{\frac{1}{2}\vartheta(\hat{\alpha}, \mathbf{n})} = \hat{1} \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} + (\hat{\alpha}, \mathbf{n}) \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} = \begin{pmatrix} \hat{1}_2 \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} & (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} \\ (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} & \hat{1}_2 \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix}$$

Посмотрим как изменяется стационарное состояние уравнения Дирака, соответствующее нулевому импульсу и энергии $+mc^2$. Зависимость от пространственно-временных координат $e^{i\frac{x^i p_i}{\hbar}}$ — это скалярный множитель выражающийся через свёртку $x^i p_i$, в нём x^i и p^i преобразуются как 4-мерные векторы:

$$p^i(\mathbf{v} = 0) = (mc, \vec{0}) \rightarrow p^i(\mathbf{v} = c \cdot \operatorname{th}(\vartheta) \mathbf{n}) = (\underbrace{\operatorname{ch}(\vartheta) mc}_{\frac{1}{c} E_{\mathbf{p}_0}}, \underbrace{\operatorname{sh}(\vartheta) mc \mathbf{n}}_{\mathbf{p}_0}).$$

Нас же интересует преобразование 4-компонентной спинорной амплитуды.

$$\begin{pmatrix} \hat{1}_2 \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} & (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} \\ (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} & \hat{1}_2 \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} u_1 \\ \operatorname{sh} \frac{\vartheta}{2} (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) u_1 \end{pmatrix} = \operatorname{ch} \frac{\vartheta}{2} \begin{pmatrix} u_1 \\ \operatorname{th} \frac{\vartheta}{2} (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) u_1 \end{pmatrix}, \quad (7.14)$$

$$\mathbf{v}_{\frac{1}{2}} = c \cdot \operatorname{th} \frac{\vartheta}{2} \mathbf{n} = \frac{c^2 \mathbf{p}_0}{E_{\mathbf{p}_0} + mc^2}$$

Мы видим, что получившийся спинор в точности соответствует амплитуде в (7.11).

В отличие от вращения, преобразование Лоренца не сохраняет скалярный квадрат спинора, так преобразование (7.14) переводит спинор с единичным скалярным квадратом в спинор со скалярным квадратом $\operatorname{ch}^2 \frac{\vartheta}{2} + \operatorname{sh}^2 \frac{\vartheta}{2} = \operatorname{ch} \vartheta$.

7.7 Уравнение Дирака в электромагнитном поле

Чтобы вставить в уравнение взаимодействие с электромагнитным полем мы можем, как и в нерелятивистском случае и в случае уравнения Клейна–Фока–Гордона, «удлинить производные». Это делается в соответствии с правилом (5.2), (5.3).

$$\hat{p}_i \rightarrow \hat{\mathcal{P}}_i = \hat{P}_i - \frac{q}{c} A_i(\underline{x}), \quad \partial_i \rightarrow \nabla_i = \partial_i - i \frac{q}{c\hbar} A_i(\underline{x}).$$

Уравнение Дирака приобретает вид

$$-c\hat{\mathcal{P}}_0\psi = (mc^2\hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \hat{\mathcal{P}}))\psi, \quad (7.15)$$

$$i\hbar\nabla_t\psi = (mc^2\hat{\beta} - i\hbar c(\hat{\alpha}, \nabla))\psi. \quad (7.16)$$

Не стоит торопиться раскрывать удлинённые импульсы (ковариантные производные). Для преобразований часто удобно записывать уравнение Дирака в форме (7.15) или (7.16).

Если раскрыть ковариантные производные уравнение Дирака в присутствии электромагнитного поля расписывается так

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\psi &= (mc^2\hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \hat{\mathcal{P}}) + q\varphi(\underline{x}))\psi = \underbrace{(mc^2\hat{\beta} + c(\hat{\alpha}, \hat{\mathbf{P}}) - q(\hat{\alpha}, \mathbf{A}(\underline{x})) + q\varphi(\underline{x}))}_{\hat{H}_{D_{\mathbf{E}, \mathbf{M}}}}\psi = \\ &= (mc^2\hat{\beta} - i\hbar c(\hat{\alpha}, \vec{\partial}) - q(\hat{\alpha}, \mathbf{A}(\underline{x})) + q\varphi(\underline{x}))\psi. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Формулы для плотности вероятности и плотность потока вероятности для уравнения Дирака не включают производных, а потому остаются прежними.

$$\rho(\underline{x}) = \psi^\dagger\psi, \quad \mathbf{j}(\underline{x}) = c\psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}\psi. \quad (7.18)$$

В уравнении непрерывности тоже можно поставить ковариантные производные, но плотность вероятности ρ и плотность потока вероятности \mathbf{j} вещественны, а значит им приписывается заряд нуль и ковариантная производная не отличается от обычной:

$$\underbrace{\nabla_t}_{\partial_t} \rho + \underbrace{\nabla}_{\partial} \mathbf{j} = 0.$$

Всё, что было сказано в § 5.4 про калибровочные преобразования полностью применимо к уравнению Дирака в присутствии электромагнитного поля.

7.8 Уравнение Паули

Для многих практических задач полезно перейти от релятивистского уравнения Дирака для частицы в электромагнитном поле к нерелятивистскому пределу. В нерелятивистском пределе вместо 4-компонентных спиноров у нас должны остаться 2-компонентные. Поэтому перепишем уравнение Дирака (7.15) через 2-компонентные спиноры ϕ_1, ϕ_2 (7.8):

$$-c\hat{\mathcal{P}}_0 \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \left(mc^2 \begin{pmatrix} \hat{1}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{1}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & (\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}}) \\ (\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}}) & 0 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

$$(-c\hat{\mathcal{P}}_0 - mc^2)\phi_1 = (\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_2, \quad (7.19)$$

$$(-c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2)\phi_2 = (\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1. \quad (7.20)$$

При рассмотрении стационарных состояний свободной дираковской частицы мы уже видели, что для частиц с положительной энергией доминирует ϕ_1 , а для частиц с отрицательной энергией — ϕ_2 , для не слишком сильного электромагнитного поля в силу непрерывности эта ситуация должна сохраняться. Мы будем рассматривать частицы с положительной энергией, а значит ϕ_2 будет малой поправкой.

Перепишем уравнение (7.20):

$$(-c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2)\phi_2 = (mc^2 \underbrace{-q\varphi + i\hbar\partial_t}_{o(mc^2)} + \underbrace{2mc^2\phi_2}_{\text{малая поправка}}) \phi_2 = 2mc^2\phi_2 + \underbrace{(-c\hat{\mathcal{P}}_0 - mc^2)\phi_2}_{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1} = (\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1.$$

Потенциальная энергия $q\varphi$ на фоне mc^2 мала, также считаем, что в суперпозиции доминируют энергии частицы близкие к mc^2 , т. е. $i\hbar\partial_t\phi_2 \approx mc^2\phi_2$.

Получаем точную формулу для ϕ_2 , которую удобно использовать для метода последовательных приближений

$$\phi_2 = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \underbrace{\frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2}}_{\sim \left| \frac{q\varphi - (E - mc^2)}{2mc^2} \right| = \epsilon \ll 1} \phi_2. \quad (7.21)$$

Видно, что при построении ряда последовательных приближений слагаемое с номером n пропорционально ϵ^n , что обеспечивает сходимость ряда.

В нулевом приближении $\phi_2^{(0)} = 0$. Подставляем нулевое приближение в правую часть равенства (7.21) и получаем первое приближение:

$$\phi_2^{(1)} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2}. \quad (7.22)$$

Во втором приближении получится

$$\phi_2^{(2)} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \phi_2^{(1)} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2}, \quad (7.23)$$

а в третьем —

$$\phi_2^{(3)} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \phi_2^{(2)} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2}. \quad (7.24)$$

Приведённая выше оценка на дробь $\left| \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \right| \sim \left| \frac{q\varphi - (E - mc^2)}{2mc^2} \right| = \epsilon \ll 1$ показывает, что в рассматриваемом приближении ряд будет сходиться¹⁰. По приведённым частичным суммам ряда видна закономерность,

¹⁰Ряд будет сходиться на соответствующем функциональном подпространстве, но если есть хотя бы небольшая примесь состояний с энергией достаточно сильно отличающейся от mc^2 , то для достаточно больших степеней ряд «испортился». Подробнее см. главу 0.

ряд соответствует ожидаемому из (7.21) выражению

$$\phi_2 = \left(\hat{1} - \frac{c\hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \right)^{-1} \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})}{2mc^2} \phi_1.$$

Для уравнения Паули нам достаточно первого приближения. Подставив (7.22) в уравнение (7.19) получаем уравнение Паули

$$(-c\hat{\mathcal{P}}_0 - mc^2)\phi_1 = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m}\phi_1. \quad (7.25)$$

Если раскрыть удлинённые импульсы, получаем

$$i\hbar\partial_t\phi_1 = \left(mc^2 + q\varphi + \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2}{2m} \right) \phi_1. \quad (7.26)$$

Преобразуем числитель дроби:

$$\begin{aligned} \left(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 &= \underbrace{\sigma_\mu \sigma_\nu}_{\hat{1}_2 \delta_{\mu\nu} + i\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda} \left(\hat{P}_\mu - \frac{q}{c}A_\mu \right) \left(\hat{P}_\nu - \frac{q}{c}A_\nu \right) = \\ &= \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 - i\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda \frac{q}{c} \underbrace{\hat{P}_\mu A_\nu}_{A_\nu \hat{P}_\mu + \underbrace{[\hat{P}_\mu, A_\nu]}_{-i\hbar \frac{\partial A_\mu}{\partial x^\nu}}} - i\varepsilon_{\mu\nu\lambda}\sigma_\lambda \frac{q}{c} A_\mu \hat{P}_\nu = \\ &= \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{c} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \sigma_\lambda \frac{\partial A_\nu}{\partial x^\mu} = \left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A} \right)^2 - \frac{q\hbar}{c} (\boldsymbol{\sigma}, \underbrace{\text{rot } \mathbf{A}}_{\mathbf{B}}). \end{aligned}$$

После этого уравнение Паули переписывается так

$$i\hbar\partial_t\phi_1 = \left(mc^2 + q\varphi + \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A})^2}{2m} - \frac{q\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B}) \right) \phi_1. \quad (7.27)$$

Добавка mc^2 в гамильтониане — это константа, её можно выкинуть сделав замену¹¹

$$\phi_1 = e^{-i\frac{mc^2 t}{\hbar}} \psi_{\text{II}}. \quad (7.28)$$

Также мы узнаём в коэффициенте перед $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B})$ магнетон Бора (если в качестве q взять элементарный заряд e):

$$\mu_0 = \frac{q\hbar}{2mc}.$$

С учётом $\hat{\vec{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ получаем уравнение Паули в стандартном виде

$$i\hbar\partial_t\psi_{\text{II}} = \underbrace{\left(\frac{(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(t, \mathbf{r}))^2}{2m} + q\varphi(t, \mathbf{r}) - (2\mu_0\hat{\vec{s}}, \mathbf{B}(t, \mathbf{r})) \right)}_{\hat{H}_{\text{II}}} \psi_{\text{II}}. \quad (7.29)$$

Оно получается из уравнения Шрёдингера нерелятивистской свободной частицы удлинением производных (5.2), (5.3) и добавлением члена, который соответствует потенциальной энергии $-(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{B})$ взаимодействия магнитного дипольного момента $\boldsymbol{\mu} = 2\mu_0\hat{\vec{s}}$ с магнитным полем \mathbf{B} .

(!) Обратите внимание, для орбитального момента коэффициент пропорциональности между \hat{l} и магнитным моментом орбитального движения $\boldsymbol{\mu}_{\text{орб.}}$ равен магнетону Бора μ_0 . Для спинового момента коэффициент пропорциональности вдвое больше и равен $2\mu_0$.

¹¹Эта замена — частный случай калибровочного преобразования (см. § 5.4), когда мы делаем добавку к скалярному потенциалу $\delta\varphi$, чтобы $q\delta\varphi$ компенсировало mc^2 .

7.8.1 Уравнение непрерывности для уравнения Паули

Выведем плотность вероятности и плотность потока вероятности для уравнения Паули из соответствующих формул для уравнения Дирака (7.18)

$$\rho(\underline{x}) = \psi^\dagger \psi = \phi_1^\dagger \phi_1 + \phi_2^\dagger \phi_2, \quad \mathbf{j}(\underline{x}) = c \psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi = c \phi_1^\dagger \boldsymbol{\sigma} \phi_2 + c \phi_2^\dagger \boldsymbol{\sigma} \phi_1.$$

Возьмём ϕ_2 и ϕ_2^\dagger в первом приближении (7.22) (как при выводе уравнения Паули)

$$\begin{aligned} \phi_2 &= \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc} = \frac{-i\hbar}{2mc} \sigma_\nu (\nabla_\nu \phi_1), \quad \phi_2^\dagger = \frac{i\hbar}{2mc} (\nabla_\mu \phi_1^\dagger) \sigma_\mu \\ \rho(\underline{x}) &= \phi_1^\dagger \phi_1 + \underbrace{\frac{i\hbar}{2mc} (\nabla_\mu \phi_1^\dagger) \sigma_\mu \frac{-i\hbar}{2mc} \sigma_\nu (\nabla_\nu \phi_1)}_{\text{сомнительный член}} \end{aligned} \quad (7.30)$$

Вызывает сомнение второе слагаемое (вклад $\phi_2^\dagger \phi_2$), поскольку оно относится к следующему порядку малости.

$$\begin{aligned} j_\kappa(\underline{x}) &= \phi_1^\dagger \sigma_\kappa \frac{-i\hbar}{2m} \sigma_\nu (\nabla_\nu \phi_1) + \frac{i\hbar}{2m} (\nabla_\nu \phi_1^\dagger) \sigma_\nu \sigma_\kappa \phi_1 = \\ &= \frac{-i\hbar}{2m} \left(\phi_1^\dagger (\nabla_\kappa \phi_1) - (\nabla_\kappa \phi_1^\dagger) \phi_1 \right) + \frac{-i\hbar}{2m} \left(\phi_1^\dagger i \epsilon_{\kappa\nu\lambda} \sigma_\lambda (\nabla_\nu \phi_1) - (\nabla_\nu \phi_1^\dagger) i \epsilon_{\nu\kappa\lambda} \sigma_\lambda \phi_1 \right) = \\ &= \frac{-i\hbar}{2m} \left(\phi_1^\dagger (\partial_\kappa \phi_1) - (\partial_\kappa \phi_1^\dagger) \phi_1 \right) - \frac{q}{mc} A_\kappa \phi_1^\dagger \phi_1 + \frac{\hbar}{2m} \epsilon_{\kappa\nu\lambda} \underbrace{\nabla_\nu}_{\partial_\nu} \left(\phi_1^\dagger \sigma_\lambda \phi_1 \right) \end{aligned}$$

Получаем плотность тока вероятности в виде

$$\mathbf{j}(\underline{x}) = \underbrace{\frac{-i\hbar}{2m} \left(\phi_1^\dagger (\partial_\nu \phi_1) - (\partial_\nu \phi_1^\dagger) \phi_1 \right)}_{\frac{-i\hbar}{2mc} (\phi_1^\dagger (\nabla_\kappa \phi_1) - (\nabla_\kappa \phi_1^\dagger) \phi_1)} - \underbrace{\frac{q}{mc} \mathbf{A} \phi_1^\dagger \phi_1}_{\mathbf{j}_{\text{rot}}} + \underbrace{\frac{\hbar}{2m} \text{rot} \left(\phi_1^\dagger \boldsymbol{\sigma} \phi_1 \right)}_{\mathbf{j}_{\text{rot}}}. \quad (7.31)$$

Подставив ток (7.31) и плотность вероятности (7.30) в уравнение непрерывности, мы убеждаемся, что действительно, в качестве плотности вероятности следует взять выражение, соответствующее обычному уравнению Шредингера

$$\rho(\underline{x}) = \phi_1^\dagger \phi_1, \quad (7.32)$$

откинув в формуле (7.32) последний член¹².

Всё кроме последнего члена в формуле (7.31) получено из стандартной формулы для плотности потока вероятности удлинением производных и суммированием по спиновой переменной. Последний член \mathbf{j}_{rot} — ротор некоторого векторного поля, а значит его дивергенция автоматически равна нулю. С точки зрения уравнения непрерывности для зарядов и токов его можно было бы отбросить. Но мы рассматриваем заряженные частицы, а для них $q \mathbf{j}$ — это уже средняя плотность электрического тока, и здесь этот член важен. Рассмотрим вклад \mathbf{j}_{rot} в электрический ток:

$$q \mathbf{j}_{\text{rot}} = \underbrace{\frac{q\hbar}{2m} \text{rot} \left(\phi_1^\dagger \boldsymbol{\sigma} \phi_1 \right)}_{c\mu_0} = c \text{rot} \underbrace{\left(\phi_1^\dagger \boldsymbol{\mu} \phi_1 \right)}_{\mathbf{M}}$$

Здесь \mathbf{M} — средний магнитный дипольный момент на единицу объёма, т. е. в терминах электродинамики сплошных сред, *намагниченность среды*¹³, а намагниченности среды даёт вклад в связанные токи¹⁴ как раз $c \text{rot} \mathbf{M}$.

7.9 Спин-орбитальное взаимодействие

Теперь по сравнению с уравнением Паули мы пойдём на шаг дальше и воспользуемся вторым приближением для ϕ_2 (7.23).

$$\phi_2^{(2)} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c \hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2} + \frac{c \hat{\mathcal{P}}_0 + mc^2}{2mc^2} \frac{(\boldsymbol{\sigma}, c \hat{\mathcal{P}})\phi_1}{2mc^2}, \quad (7.33)$$

¹²Для уравнения Дирака уравнение непрерывности выполняется, но когда мы разлагаем его решение в ряд, а потом ряд обрываем (получаем уравнение Паули), то получившееся приближённое решение может не удовлетворять уравнению непрерывности. В данном случае уравнение непрерывности удаётся модифицировать, чтобы оно снова выполнялось.

¹³В данном случае среда — это Дираковское поле.

¹⁴Подробнее про связанные заряды и токи в электродинамике сплошных сред см., например, главу 3.15 книги МТП.

Второе слагаемое мало по сравнению с первым, так что мы получим уравнение Паули с малыми поправками. Для атомных спектров эти поправки дают вклад в *тонкую структуру*.

При подстановке (7.33) в уравнение (7.19) получаем

$$(-c\hat{P}_0 - mc^2)\phi_1 = \left(\frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m} + \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})(c\hat{P}_0 + mc^2)(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})}{4m^2c^2} \right) \phi_1. \quad (7.34)$$

Чтобы преобразовать второе слагаемое

$$\hat{P}_0(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}}) = \hat{P}_0\sigma_\mu \hat{P}_\mu = \sigma_\mu \hat{P}_\mu \hat{P}_0 + \sigma_\mu \underbrace{[\hat{P}_0, \hat{P}_\mu]}_{i\frac{q\hbar}{c} F_{0\mu} = -i\frac{q\hbar}{c} E_\mu} = (\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})\hat{P}_0 - i\frac{q\hbar}{c}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}).$$

Вторую дробь в правой части уравнения разобьём на два равных слагаемых, в одном вынесем $(c\hat{P}_0 + mc^2)$ направо, а во втором — налево:

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})(c\hat{P}_0 + mc^2)(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})}{4m^2c^2} = \frac{1}{4mc^2} \left\{ \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m} \underbrace{(c\hat{P}_0 + mc^2)}_{\approx -\frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m}} + \underbrace{(c\hat{P}_0 + mc^2)}_{\approx -\frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m}} \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m} \right\} - i\frac{q\hbar}{8m^2c^2} [(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}}), (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E})]$$

В силу малости вклада данного члена мы можем из уравнения Паули (7.25) положить здесь $(c\hat{P}_0 + mc^2) = -\frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m}$. Распишем коммутатор в последнем слагаемом, воспользовавшись тем, что σ_λ коммутируют с \hat{P}_μ и E_ν

$$\begin{aligned} [(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}}), (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E})] &= [\sigma_\mu \hat{P}_\mu, \sigma_\nu E_\nu] = \sigma_\mu [\hat{P}_\mu, \sigma_\nu E_\nu] + [\sigma_\mu, \sigma_\nu E_\nu] \hat{P}_\mu = \\ &= \sigma_\mu \sigma_\nu [\hat{P}_\mu, E_\nu] + [\sigma_\mu, \sigma_\nu] E_\nu \hat{P}_\mu = (\delta_{\mu\nu} + i\epsilon_{\mu\nu\lambda} \sigma_\lambda) [\hat{P}_\mu, E_\nu] + 2i\epsilon_{\mu\nu\lambda} E_\nu \hat{P}_\mu = \\ &= \underbrace{[\hat{P}_\mu, E_\mu]}_{-i\hbar \operatorname{div} \mathbf{E}} + i\epsilon_{\mu\nu\lambda} \underbrace{(\hat{P}_\mu E_\nu + E_\nu \hat{P}_\mu)}_{2\hat{P}_\mu \circ E_\nu} \sigma_\lambda = -i\hbar 4\pi \varrho_{\text{внеш.}} + i2(\hat{\mathcal{P}} \circ \mathbf{E} \circ \boldsymbol{\sigma}). \end{aligned}$$

Здесь $\varrho_{\text{внеш.}}$ — плотность внешних электрических зарядов (которые создают внешние потенциалы, входящие в удлинённые импульсы), кружок \circ означает симметризованное произведение. Смешанное произведение с кружками вместо запятых построено с помощью симметризованных произведений. Обратите внимание, в последний член вошёл удлинённый импульс $\hat{\mathcal{P}}$, который соответствует кинематическому импульсу $\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$.

Уравнение принимает вид

$$-c\hat{P}_0\phi_1 = \left(\underbrace{mc^2 + \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m} - \frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^4}{8m^3c^2}}_{\sqrt{m^2c^4 + (\boldsymbol{\sigma}, c\hat{\mathcal{P}})^2 + mc^2 \cdot o\left(\frac{\mathcal{P}^4}{m^4c^4}\right)}} + q\frac{-\pi\hbar^2 \varrho_{\text{внеш.}}}{2m^2c^2} + \frac{\mu_0(\hat{\mathcal{P}} \circ \mathbf{E} \circ \boldsymbol{\sigma})}{2mc} \right) \phi_1. \quad (7.35)$$

Как и раньше можно избавиться от слагаемого mc^2 сделав замену (7.28) $\phi_1 = e^{-i\frac{mc^2t}{\hbar}} \psi_{\text{пп.}}$

Плотность внешних зарядов даёт эффективную добавку к скалярному потенциалу $\varphi_{\text{эфф.}} = \frac{-\pi\hbar^2 \varrho_{\text{внеш.}}}{2m^2c^2}$. Если в интересующей нас области нет внешних зарядов, то соответствующий член исчезает.

Мы уже установили, при выводе уравнения Паули, что

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}, \hat{\mathcal{P}})^2}{2m} = \frac{(\hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \mathbf{A})^2}{2m} - \mu_0(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B}).$$

С помощью этой формулы мы можем расписать уравнение (7.35).

Последний член уравнения (7.35) имеет вид энергии магнитного диполя в некотором добавочном магнитном поле:

$$\frac{\mu_0(\hat{\mathcal{P}} \circ \mathbf{E} \circ \boldsymbol{\sigma})}{2mc} = -(\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\mathbf{B}}_{\text{эфф.}}), \quad \hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma}, \quad \hat{\mathbf{B}}_{\text{эфф.}} = \frac{1}{2c} [\mathbf{E} \times \circ \frac{\hat{\mathcal{P}}}{m}], \quad [\mathbf{a} \times \circ \mathbf{b}]_\lambda = \epsilon_{\mu\nu\lambda} \underbrace{\hat{a}_\mu \hat{b}_\nu + \hat{b}_\nu \hat{a}_\mu}_{2}.$$

Если имеется центральное электрическое поле, т. е. поле, создаваемое потенциалом $\varphi(r) = \varphi(|\mathbf{r}|)$, то

$$\mathbf{E} = -\varphi'(r) \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \hat{\mathbf{B}}_{\text{эфф.}} = -\frac{\varphi'(r)}{2mcr} \underbrace{[\mathbf{r} \times \circ \hat{\mathcal{P}}]}_{\hbar \hat{l}_{\text{кин.}}} = -\frac{\varphi'(r)\hbar}{2mcr} \hat{l}_{\text{кин.}}$$

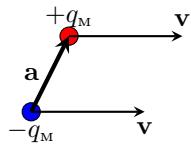


Рис. 7.1: Движущийся магнитный диполь представленный как пара магнитных зарядов

тогда последний член уравнения (7.35) приобретает вид спин-орбитального взаимодействия

$$\frac{\mu_0(\hat{\mathcal{P}} \circ \mathbf{E} \circ \boldsymbol{\sigma})}{2mc} = \frac{\varphi'(r)\hbar}{2mc} (\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\vec{l}}_{\text{кин.}}).$$

(!*) Интересно, что в спин-орбитальное взаимодействие входит *момент кинематического импульса*. В присутствии векторного потенциала он отличается от обычного (обобщённого!) орбитального момента \hat{l} , в частности его проекции могут принимать значения не кратные $\frac{1}{2}$.

В сферически-симметричном электростатическом случае уравнение (7.35) приобретает вид

$$i\hbar\partial_t\psi_{\text{п}} = \left(q\varphi(r) + \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}}_{\sqrt{m^2c^4 + c^2\hat{\mathbf{p}}^2} - mc^2 + mc^2 \cdot o\left(\frac{p^4}{m^4c^4}\right)} + \frac{\varphi'(r)\hbar}{2mc} (\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\vec{l}}) + q\underbrace{\frac{\hbar^2(\varphi'' + 2\varphi'/r)}{8m^2c^2}}_{\varphi_{\text{зФФ.}}(r)} \right) \psi_{\text{п}}. \quad (7.36)$$

В кулоновском поле $\varphi^{\text{K}}(r) = \frac{Q}{r}$ и последнее слагаемое даёт *дарвиновскую поправку* (*дарвиновский член*):

$$\varphi_{\text{зФФ.}}^{\text{K}}(\mathbf{r}) = \frac{-\pi\hbar^2 Q \delta^3(\mathbf{r})}{2m^2c^2}.$$

В атомных спектрах релятивистская поправка $-\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}$ и *спин-орбитальное взаимодействие* $\frac{\varphi'(r)\hbar}{2mc} (\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\vec{l}})$ и *дарвиновский член* $q\frac{-\pi\hbar^2 Q \delta^3(\mathbf{r})}{2m^2c^2}$ дают вклад в *тонкую структуру*.

7.9.1 Классический вывод спин-орбитального взаимодействия

Движущийся магнитный диполь приобретает электрический дипольный момент. Чтобы увидеть это проще всего представить магнитный диполь $\boldsymbol{\mu}$ по аналогии с электрическим, как пару магнитных зарядов (монополей) $\pm q^{\text{M}}$, разделённых вектором \mathbf{a}

$$\boldsymbol{\mu} = q^{\text{M}} \mathbf{a}.$$

Пусть такая «гантелька» движется со скоростью \mathbf{v} (см. рис. 7.1).

Подобно тому, как движущиеся электрические заряды q^{e} могут создавать магнитный дипольный момент, движущиеся магнитные заряды q^{M} могут создавать электрический дипольный момент¹⁵:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2c} \sum_k q_k^{\text{M}} [\mathbf{r}_k \times \mathbf{v}_k] \quad \text{аналогично} \quad \mathbf{d} = -\frac{1}{2c} \sum_k q_k^{\text{M}} [\mathbf{r}_k \times \mathbf{v}_k]. \quad (7.37)$$

В рассматриваемом случае электрический дипольный момент не зависит от положения начала координат и равняется

$$\mathbf{d} = -\frac{q^{\text{M}}}{2c} [\mathbf{a} \times \mathbf{v}] = -\frac{1}{2c} [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{v}].$$

Потенциальная энергия электрического дипольного момента во внешнем электрическом поле может быть переписана как потенциальная энергия магнитного дипольного момента в некотором эффективном магнитном поле:

$$U_E = -(\mathbf{d}, \mathbf{E}) = \frac{1}{2c} (\mathbf{E}, [\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{v}]) = -\left(\boldsymbol{\mu}, \frac{1}{2c} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}]\right) = -(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{B}_{\text{зФФ.}}).$$

Эффективное магнитное поле $\mathbf{B}_{\text{зФФ.}} = \frac{1}{2c} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}]$ составляет ровно половину магнитного поля, возникающего при переходе в движущуюся с малой скоростью \mathbf{v} ($v \ll c$) систему отсчёта¹⁶.

¹⁵Переход между электрическими зарядами и магнитными описывается с помощью зарядового вращения, при котором все электрические величины (поля, моменты) переходят в магнитные, а все магнитные — в электрические со знаком минус. Отсюда происходит различие в знаках в формулах (7.37). Подробнее про зарядовое вращение можно прочитать в книге МТП § 4.7.3.

¹⁶Преобразование Лоренца для электромагнитного поля и их предельный вид при малых скоростях см., например, в книге МТП § 1.13.4.

(*) Половину магнитного поля в системе отсчёта магнитного диполя компенсирует прецессия Томаса¹⁷ возникающая при ускоренном движении диполя.

В кулоновском поле

$$\mathbf{E} = \frac{q}{r^3} \mathbf{r},$$

$$U_E = -\left(\boldsymbol{\mu}, \frac{1}{2c} [\mathbf{E} \times \frac{\mathbf{p}}{m}] \right) = -\frac{q}{2mc r^3} \left(\boldsymbol{\mu}, \underbrace{[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]}_{\mathbf{L}_{\text{кин.}}} \right) = -\frac{q}{2mc r^3} (\boldsymbol{\mu}, \mathbf{L}_{\text{кин.}}).$$

Соответствующая добавка к квантовому гамильтониану:

$$\hat{H}_{\text{сп.опб.}} = -\frac{q\hbar}{2mc r^3} \left(\boldsymbol{\mu}, \hat{\vec{l}}_{\text{кин.}} \right).$$

Эффективное магнитное поле:

$$\hat{\mathbf{B}}_{\text{эфф.}} = \frac{q\hbar \hat{\vec{l}}_{\text{кин.}}}{2mc r^3}.$$

¹⁷Про прецессию Томаса в классической (не квантовой) теории см. МТП § 2.8.8 задачи 24, 25 и § 2.8.9.

Глава 8

Тождественные частицы

8.1 Перестановочная симметрия

Рассмотрим оператор перестановки двух частиц¹. Такой оператор переставляет у волновой функции все аргументы, относящиеся к 1-й частице ξ_1 и все аргументы, относящиеся ко второй частице ξ_2 :

$$\hat{P}_{12} \psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1).$$

Аналогично мы можем ввести оператор $\hat{P}_{n_1 n_2}$ переставляющий частицы с номерами n_1 и n_2 .

Очевидно, что оператор \hat{P}_{12} сохраняет скалярный квадрат $\langle \hat{P}_{12} \psi | \hat{P}_{12} \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle$ и является обратимым $\hat{P}_{12}^2 = \hat{1}$, т. е. $\hat{P}_{12} = \hat{P}_{12}^{-1} = \hat{P}_{12}^\dagger$. Оператор является унитарным и эрмитовым, его собственные числа — ± 1 .

Если две частицы имеют одинаковые свойства, то их перестановка является симметрией системы, т. е. $[\hat{P}_{12}, \hat{H}] = 0$, а оператор \hat{P}_{12} соответствует сохраняющейся величине², которая называется *чётностью по отношению к перестановке частиц*.

Частицы одного сорта в квантовой механике в принципе неразличимы. Это означает, что перестановка двух частиц одного сорта не должна менять состояние системы, т. е. при перестановке тождественных частиц волновая функция оставаться прежней с точностью до фазового множителя. Таким образом, по отношению к перестановке тождественных частиц волновая функция может быть либо чётной, либо нечётной, но она не может быть линейной комбинацией чётной и нечётной частей, т. е. какая-то чётность должна быть обязательно. В силу неразличимости тождественных частиц чётность по отношению к перестановке для каждого сорта частиц должна быть фиксированной.

В квантовой теории поля доказывается *Теорема о связи спина со статистикой*³, согласно которой чётность по отношению к перестановке тождественных частиц задаётся их спином:

- тождественные частицы **с целым спином** (бозоны) всегда **чётны** по отношению к перестановке;
- тождественные частицы **с полуцелым спином** (фермионы) всегда **нечётны** по отношению к перестановке.

В нашем курсе теорема о связи спина со статистикой вводится без доказательства, как хорошо установленный на эксперименте закон природы.

8.2 Невзаимодействующие тождественные частицы

Без учёта тождественности, если система состоит из невзаимодействующих подсистем, то собственные состояния системы в целом можно представить в виде тензорного произведения⁴ собственных состояний

¹Частицы должны описываться одинаковым набором переменных, в частности они должны иметь одинаковый спин.

²Если свойства частиц совпадают лишь приближённо, то мы имеем приближённую симметрию и приближённый закон сохранения. В этом случае обычно гамильтониан представляют в виде $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где $[\hat{P}_{12}, \hat{H}_0] = 0$, а \hat{V} — малая поправка. Например, в задачах ядерной физики перестановка нейтрона и электрона является приближённой симметрией.

³Пока речь идёт не о статистике, а о перестановочной симметрии. Статистики Бозе и Ферми появятся позже, при рассмотрении задач статистической физики.

⁴Напоминаем, что такое тензорное произведение.

Если $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$, то можно подобрать такие аргументы волновой функции, что $\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2)$.

Когда тензорное произведение операторов действует на волновую функцию, то каждый множитель действует на свой аргумент:

$$\hat{A} \otimes \hat{B} \psi_1(\xi_1) \psi_2(\xi_2) = (\hat{A} \psi_1(\xi_1)) (\hat{B} \psi_2(\xi_2)).$$

подсистем

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{H}_2, \quad \left(\hat{H}_1 \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{H}_2 \right) \psi_1 \otimes \psi_2 = \underbrace{(\hat{H}_1 \psi_1)}_{E_1 \psi_1} \otimes \psi_2 + \psi_1 \otimes \underbrace{(\hat{H}_2 \psi_2)}_{E_2 \psi_2} = \underbrace{(E_1 + E_2)}_E \psi_1 \otimes \psi_2.$$

В состоянии $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$ определённые независимые состояния есть у обеих подсистем: у первой — ψ_1 , у второй — ψ_2 . В этом случае подсистемы не скоррелированы: что бы мы ни делали и что бы мы ни узнавали про одну подсистему на другую никак не влияет⁵.

Если подсистемы одинаковы, то, вместе с состоянием $\psi(\xi_1, \xi_2)$, стационарным состоянием с той же энергией также является состояние $\hat{P}_{12}\psi(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_2, \xi_1)$. Также стационарными являются любые линейные комбинации этих двух состояний, в том числе

$$\psi_+(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_1, \xi_2) + \psi(\xi_2, \xi_1) = (\hat{1} + \hat{P}_{12})\psi(\xi_1, \xi_2), \quad \psi_-(\xi_1, \xi_2) = \psi(\xi_1, \xi_2) - \psi(\xi_2, \xi_1) = (\hat{1} - \hat{P}_{12})\psi(\xi_1, \xi_2).$$

Если подсистемы — тождественные частицы, то стационарные состояния должны обладать определённой чётностью по отношению к их перестановке. Для фермионов возможно антисимметричное состояние ψ_- и невозможно симметричное состояние ψ_+ , а для бозонов — наоборот.

Если исходное состояние имело вид тензорного произведения $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$, то антисимметризованное состояние ψ_- уже не будет тензорным произведением (кроме случая $\psi_1 = \psi_2 \Rightarrow \psi_- = 0$). Таким образом, даже невзаимодействующие фермионы не могут быть описаны как независимые подсистемы. Это понятно как следствие принципа запрета Паули: состояние второго фермиона не может быть независимо от состояния первого, т. к. состояние занятое первым фермионом для второго недоступно.

Для бозонов ситуация похожая. Если исходное состояние имело вид тензорного произведения $\psi = \psi_1 \otimes \psi_2$, то симметризованное состояние ψ_+ уже не будет тензорным произведением, кроме случая $\psi_1 = \psi_2 \Rightarrow \psi_+ = 2\psi_1 \otimes \psi_1$. Вроде бы в случае $\psi_1 = \psi_2$ состояния бозонов *кажутся* независимыми, но какое бы измерение мы не провели над одним из бозонов волновая функция останется симметричной, а значит изменится состояние обоих бозонов.

(!) Тождественные частицы одного сорта могут быть невзаимодействующими, но не могут быть независимыми.

При рассмотрении ансамбля тождественных частиц в качестве невозмущённого гамильтониана часто бывает удобно взять гамильтониан без учёта взаимодействия.

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{a=1}^n \hat{H}_a}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\hat{V}(\xi_1, \dots, \xi_n)}_{\text{симметрично по перестановкам}}, \quad \hat{H}_a = \underbrace{\hat{1} \otimes \hat{1} \otimes \dots \hat{1} \otimes \hat{H}_{1\text{ч.}} \otimes \dots \otimes \hat{1}}_{n \text{ множителей, } \hat{H}_{1\text{ч.}} \text{ в позиции } \#a}.$$

При этом нахождение невозмущённых стационарных состояний для гамильтониана \hat{H}_0 сводится к нахождению стационарных состояний для гамильтониана $\hat{H}_{1\text{ч.}}$

$$\hat{H}_{1\text{ч.}}\psi_k = E_k\psi_k.$$

Потом из одиночественных состояний строим с помощью тензорного произведения n -частичные

$$E_{k_1 k_2 \dots k_n}^{(0)} = \sum_{a=1}^n E_{k_a}, \quad \psi_{k_1 k_2 \dots k_n}^{(0)} = \psi_{k_1} \otimes \psi_{k_2} \otimes \dots \otimes \psi_{k_n}.$$

И наконец тензорные произведения симметризуем (для бозонов)

$$\psi_{[k_1 k_2 \dots k_n]}^{(0)} = C \sum_{\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)} \psi_{\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)}^{(0)} \quad (8.1)$$

или антисимметризуем (для фермионов)

$$\psi_{[k_1 k_2 \dots k_n]}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)} (-1)^{\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)} \psi_{\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)}^{(0)} \quad (8.2)$$

Здесь $\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)$ — некоторая перестановка индексов k_1, k_2, \dots, k_n , $(-1)^{\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)}$ — это $+1$ для чётных перестановок и -1 для нечётных, суммы берутся по всем возможным перестановкам $\Sigma(k_1 k_2 \dots k_n)$.

⁵В классической теории вероятности аналогичная ситуация имеет место для распределений вероятностей вида $\rho(\xi_1, \xi_2) = \rho_1(\xi_1)\rho_2(\xi_2)$. Величины ξ_1 и ξ_2 независимы, что бы мы ни узнали про ξ_1 про ξ_2 мы ничего не знаем. Помимо совместного распределения вероятностей $\rho(\xi_1, \xi_2)$ существуют независимые распределения вероятностей по ξ_1 и по ξ_2 .

Индексы в круглых скобках означают симметризацию, в квадратных — антисимметризацию.

Нормировочный множитель явно выписан только для антисимметризации, поскольку для симметризации он зависит от числа повторяющихся индексов (при антисимметризации повторяющиеся индексы обнуляют выражение).

Формулу (8.2) удобно записать через определитель Слэтера

$$\psi_{[k_1 k_2 \dots k_n]}^{(0)}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \begin{pmatrix} \psi_1(\xi_1) & \psi_2(\xi_1) & \dots & \psi_n(\xi_1) \\ \psi_1(\xi_2) & \psi_2(\xi_2) & \dots & \psi_n(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(\xi_n) & \psi_2(\xi_n) & \dots & \psi_n(\xi_n) \end{pmatrix}. \quad (8.3)$$

Далее уже (анти)симметризованные волновые функции невозмущённого гамильтониана используются как нулевое приближение в теории возмущений.

(!) Можно сначала (анти)симметризовать волновые функции, а потом посчитать поправки (как мы описано выше), или можно сперва посчитать поправки, а потом (анти)симметризовать волновые функции. Результат получается разный! (В первом случае точнее.) Различие в первых поправках к энергии в этом случае называют *обменным взаимодействием*, хотя никакого взаимодействия кроме оператора \hat{V} в обоих случаях нет.

8.3 Разделение координатных и спиновых переменных

Если имеется система тождественных частиц, причём координатные и спиновые переменные не взаимодействуют, то стационарные состояния могут быть найдены в виде произведения координатной волновой функции ϕ и спиновой⁶ χ :

$$\underbrace{\psi(\mathbf{r}_1, m_1^s; \mathbf{r}_2, m_2^s; \dots; \mathbf{r}_n, m_n^s)}_{\xi_1 \quad \xi_2 \quad \xi_n} = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) \chi(m_1^s, m_2^s, \dots, m_n^s).$$

Оператор перестановки частиц $\hat{P}_{n_1 n_2}$ при этом представляется как произведение двух коммутативных множителей: оператора перестановки координатных переменных $\hat{P}_{n_1 n_2}^r$ и оператора перестановки спиновых переменных $\hat{P}_{n_1 n_2}^s$. При этом обе функции ϕ и χ должны обладать определённой перестановочной чётностью, а общая чётность должна быть +1 для бозонов, или -1 для фермионов.

Если при этом спиновый момент сохраняется, то можно выбрать спиновые волновые функции как функции с определённым значением суммарного спина S и его проекции на ось z — M_S . Полученные таким разделением переменных состояния часто возникают как правильные волновые функции нулевого порядка стационарной теории возмущений.

Рассмотрим это разделение подробнее в простейшем случае двух тождественных частиц.

Пусть имеются две частицы со спином s . Тогда число независимых спиновых состояний для двух частиц составляет $(2s + 1)^2$. Состояние с максимальной проекцией спина всегда симметрично:

$$\underbrace{|2s, 2s\rangle}_{\text{2-частичное спиновое состояние}} = \underbrace{|s, s\rangle \otimes |s, s\rangle}_{\text{тензорное произведение 1-частичных состояний}}.$$

Понижающий оператор $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-} = \hat{s}_- \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{s}_-$ сохраняет чётность (переводит чётные состояния в чётные, а нечётные — в нечётные), поэтому все состояния с определённым значением S имеют одинаковую чётность. Состояние $|S, S\rangle$ ($S < 2s$) мы каждый раз получаем из ортогональности к другим состояниям с большим суммарным спином той же проекцией спина, при этом чётности чередуются⁷. Так что перестановочная чётность спиновой волновой функции для суммарного спина S равна $(-1)^{2s-S}$. Общая чётность волновой функции ψ должна равняться $(-1)^{2s}$. Таким образом, чётность координатной волновой функции двух тождественных частиц ϕ определяется чётностью суммарного спина:

$$\phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = (-1)^S \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

⁶Спиновые аргументы волновой функции в литературе обозначают по-разному. Мы используем стандартное обозначение для проекции углового момента m , обязательно приписывая (чтобы избежать путаницы) к m различные индексы. Так m_1^s и m_{s1} — проекция спина 1-й частицы, но m_{s1} будет использоваться для нумерации базисных состояний, а m_1^s — как аргумент волновой функции. Аналогично m_{l1} — проекция орбитального момента 1-й частицы. Аналогично для суммарного спина S проекция будет обозначаться M_S , для суммарного орбитального момента L — как M_L , для полного момента импульса J — как M_J . Во всех случаях мы будем использовать обезразмеренные моменты импульса.

⁷Мы уже обсуждали тему сложения угловых моментов. См. КПКМ-15.5.

8.4 Обменный член

Рассмотрим влияние симметризации/антисимметризации координатной волновой функции на энергетические уровни системы тождественных частиц (*обменное член*) на примере двух частиц.

(!) В литературе обменный член называют также *обменным взаимодействием*. Но никакого отдельного от прочих взаимодействий обменного взаимодействия не существует! Обычно имеется в виду обменный член кулоновского взаимодействия.

Пусть две тождественные частицы находятся в одной потенциальной яме $U(\mathbf{r})$, а энергия их взаимодействия V зависит от расстояния между частицами $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$.

Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \overbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1)}^{\hat{H}_1} + \overbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + U(\mathbf{r}_2)}^{\hat{H}_2} + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

$\hat{H}_1 = \hat{H}_{1\text{ч.}} \otimes \hat{1}$ $\hat{H}_2 = \hat{1} \otimes \hat{H}_{1\text{ч.}}$

Здесь мы выделили гамильтонианы первой и второй частиц в потенциальной яме \hat{H}_1 и \hat{H}_2 . Их сумму \hat{H}_0 мы берём в качестве невозмущённого гамильтониана, а взаимодействие V в качестве возмущения⁸.

Уровни энергии невозмущённой системы находятся через уровни энергии одиночной частицы в яме $U(\mathbf{r})$:

$$\hat{H}_{1\text{ч.}} \psi_{1,2} = E_{1,2} \psi_{1,2}, \quad E^{(0)} = E_1 + E_2.$$

В гамильтониане отсутствуют спиновые операторы, так что координатные и спиновые переменные разделяются (см. § 8.3 «Разделение координатных и спиновых переменных»). Координатная часть волновой функции симметризуется или антисимметризуется в зависимости от чётности суммарного спина:

$$\psi(\mathbf{r}_1, m_1^s; \mathbf{r}_2, m_2^s) = \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} \chi_{S, M_S}(m_1^s, m_2^s) \quad (8.4)$$

Найдём первую поправку к энергии в стационарной теории возмущений, используя невозмущённые волновые функции (8.4):

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \\ &= \int \frac{\psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2^*(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \psi_2^*(\mathbf{r}_1) \psi_1^*(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \psi_2(\mathbf{r}_1) \psi_1(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}} d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 = \\ &= \int \underbrace{|\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2}_{\rho_1(\mathbf{r}_1)} V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \underbrace{|\psi_1(\mathbf{r}_2)|^2}_{\rho_2(\mathbf{r}_2)} d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 + \\ &\quad + (-1)^S \int \underbrace{\psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_1)}_{\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)} V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \underbrace{\psi_2^*(\mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_2)}_{\rho_{\text{обм.}}^*(\mathbf{r}_2)} d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \end{aligned} \quad (8.5)$$

Поправка к энергии распалась на два слагаемых. Первое слагаемое

$$K = \int \rho_1(\mathbf{r}_1) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \rho_2(\mathbf{r}_2) \quad (8.6)$$

соответствует энергии взаимодействия первой частицы, распределённой с плотностью $\rho_1(\mathbf{r}_1)$ и второй частицы, распределённой с плотностью $\rho_2(\mathbf{r}_2)$. Если бы мы взяли в качестве невозмущённой волновой функции $\psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2)$, то поправка к энергии была бы в точности равна этому слагаемому (8.6).

Второе слагаемое называется *обменным членом* (или *обменным интегралом*)

$$\begin{aligned} J &= \int \underbrace{\psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_1)}_{\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)} V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \underbrace{\psi_2^*(\mathbf{r}_2) \psi_1(\mathbf{r}_2)}_{\rho_{\text{обм.}}^*(\mathbf{r}_2)} d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 = \\ &= \int \text{Re}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \text{Re}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_2)) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \\ &\quad + \int \text{Im}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \text{Im}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_2)) d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2. \end{aligned} \quad (8.7)$$

⁸Такое разбиение гамильтониана на невозмущённую часть и возмущение очевидно, но неоптимально. В § 9.2 «Вариационный метод для сложного атома» мы найдём лучшее разбиение, когда невозмущённый гамильтониан будет взят в приближении среднего поля, частично учитывая взаимодействие электронов в атоме.

Оно выглядит как удвоенная энергия взаимодействия частиц с некоторой (в общем случае комплексной) одинаковой плотностью $\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r})$ (если ψ_1 и ψ_2 вещественны, то $\rho_{\text{обм.}} = \sqrt{\rho_1 \rho_2}$). Обменный интеграл, вообще говоря, не является малым по сравнению с (8.6).

Обменный член интересует нас в первую очередь для случая *сложного* (многоэлектронного) атома.

(Ф) Так нашему двухчастичному случаю соответствует атом гелия, если взять $U(\mathbf{r}) = -\frac{2e^2}{r}$ — энергия взаимодействия электрона с ядром, а $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ — энергия взаимодействия двух электронов. В этом случае суммарный спин электронов $S = 0$ (одна поляризация) или $S = 1$ (три поляризации). Обменный интеграл J положителен. Так что при $S = 0$ получается положительная добавка к энергии (как бы некоторое дополнительное отталкивание электронов), а при $S = 1$ — отрицательная добавка к энергии (как было некоторое дополнительное притяжение электронов). Разумеется, никакого взаимодействия электронов кроме электростатического мы здесь не учитываем. Просто при $S = 0$ координатная волновая функция симметрична, и ϕ отлична от нуля при $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$, а при $S = 1$ координатная волновая функция антисимметрична, и ϕ обращается в нуль при $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$. Таким образом при $S = 0$ электроны друг к другу оказываются в среднем ближе, чем при $S = 1$.

(Ф*) Обменный член связан со спином и с тождественностью частиц только опосредованно. Он связано с симметрией гамильтониана по отношению к перестановке частиц. Пусть, например, мы рассматриваем задачу связанную с сильным ядерным взаимодействием. Это взаимодействие практически не различает протоны и нейтроны (*нуклоны*). Массы протона и нейтрона тоже очень близки. Тогда мы можем в нульевом приближении пренебречь различием масс нуклонов. Тогда, если в потенциальной яме находятся протон и нейtron, то у нас есть приближённая симметрия гамильтониана по отношению к их перестановке (их различие мы учтём в следующих порядках теории возмущений). Поскольку протон и нейtron различимы, волновая функция системы протон + нейtron может быть как чётной, так и нечётной, чётность координатной волновой функцией уже никак не связана с суммарным спином. Тем не менее, мы, прежде чем считать поправку к энергии, можем перейти к невозмущённым волновым функциям с определённой чётностью и взаимодействие протона с нейtronом даст расщепление по энергии между состояниями с различной чётностью координатной волновой функции, которое соответствует обменному члену.

8.5 Пространства Фока*

(!) В квантовой механике возможны суперпозиции состояний, содержащих различное число частиц! Это экспериментальный факт.

Используемые до сих пор волновые функции с конечным числом аргументов подразумевают, что система имеет фиксированное конечное число степеней свободы. Система с переменным числом частиц имеет переменное (потенциально бесконечное) число степеней свободы. Для описания таких систем и вводятся *пространства Фока*.

Пусть у нас имеется некоторая частица, описывающаяся полным набором наблюдаемых ξ^9 Для одной такой частицы пространство состояний — гильбертово пространство — пространство квадратично-интегрируемых функций от аргумента ξ , обозначим его \mathcal{H}_1 . Возьмём в этом пространстве какой-нибудь ортонормированный дискретный базис:

$$\{|k\rangle\}_{k \in \mathbb{N}}, \quad \langle k_1 | k_2 \rangle = \delta_{k_1 k_2}, \quad \sum_k |k\rangle \langle k| = \hat{1}_{\mathcal{H}_1}. \quad (8.8)$$

Сначала введём пространство Фока для различимых частиц:

$$F(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_1^{\otimes n} = \underbrace{\mathcal{H}_1^{\otimes 0}}_{\mathcal{H}_0 = \mathbb{C}^1} \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1}_{\mathcal{H}_2} \oplus \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1}_{\mathcal{H}_3} \oplus \cdots \oplus \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1}_{n \text{ раз}} \oplus \dots \mathcal{H}_n$$

Базис в пространстве $F(\mathcal{H}_1)$ — объединение базисов для подпространств с разным числом частиц: 0-частичного базиса, 1-частичного базиса, 2-частичного базиса, ..., n -частичного базиса, ...

$$\underbrace{\{1\}}_{0\text{-частичный 1-мерный базис}} \cup \underbrace{\{|k\rangle\}_{k \in \mathbb{N}}}_{1\text{-частичный базис}} \cup \underbrace{\{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle\}_{k_1, k_2 \in \mathbb{N}}}_{2\text{-частичный базис}} \cup \cdots \cup \underbrace{\{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \otimes \cdots \otimes |k_n\rangle\}_{k_1, k_2, \dots, k_n \in \mathbb{N}}}_{n\text{-частичный базис}} \cup \dots$$

В каждом из состояний этого базиса определено число частиц, а для каждой частицы с номером i определено какое одночастичное состояние $\psi^i(\xi_i) \in \mathcal{H}_1$ она занимает. Состояния отличающиеся перестановкой частиц в этом базисе (и в пространстве $F(\mathcal{H}_1)$) могут различаться.

⁹Обычно это радиус-вектор и проекция спина: $\xi = (\mathbf{r}, m^s)$.

Волновая функция в пространстве Фока может быть записана как линейная комбинация функций с разным числом аргументом:

$$\Psi = \underbrace{\psi_0}_{\text{функция от 0 переменных (число)}} + \psi_1(\xi_1) + \psi_2(\xi_1, \xi_2) + \psi_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3) + \dots + \psi_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) + \dots \quad (8.9)$$

Скалярное произведение записывается исходя из того, что состояния с разным числом частиц являются взаимоисключающими (ортогональны друг другу)

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi_n | \phi_n \rangle$$

Здесь 1-мерное скалярное произведение — это

$$\langle \psi_0 | \phi_0 \rangle = \psi_0^* \phi_0,$$

а остальные скалярные произведения определяются обычным образом через суммы и/или интегралы:

$$\langle \psi_n | \phi_n \rangle = \int \psi_n^*(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \phi_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n.$$

Если $\xi_k = (\mathbf{r}_k, m_k^s)$, то интеграл по ξ_k — это интеграл по \mathbf{r}_k и сумма по m_k^s .

(?) Как понимать волновую функцию Ψ (8.9) как функцию? Если это действительно функция, то каковы её аргументы и как по аргументам определяется значение? Значения обычной волновой функции — амплитуды вероятностей, соответствующие состояниям, заданным аргументами волновой функции. В волновую функцию с неопределенным числом частиц можно подставлять разное число аргументов. n аргументов ξ_1, \dots, ξ_n задают n -частичное состояние и, если их подставить в соответствующее слагаемое, то $\psi_n(\xi_1, \dots, \xi_n)$ даёт амплитуду вероятностей этого состояния. Так что при вычислении функции Ψ от заданного числа аргументов в сумму (8.9) каждый раз даёт вклад ровно одно слагаемое. Так что $\psi_n(\xi_1, \dots, \xi_n)$ — это n -частичная волновая функция, нормированная (если $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$) на вероятность того, что система содержит ровно n частиц. Почему функцию переменного числа аргументов физики представили как сумму функций от разного числа аргументов? Эта сумма — сумма ортогональных векторов. Для векторов состояния состояний с фиксированным числом частиц сумма векторов соответствует сумме волновых функций, поэтому и для волновых функций с переменным числом аргументов принято то же соотношение. Почему вообще можно складывать векторы состояния, отвечающие разному числу частиц? А с этого мы начали параграф: «В квантовой механике возможны суперпозиции состояний, содержащих различное число частиц!»

(!) Нуль-частичная волновая функция ψ_0 в формуле (8.9) — это амплитуда вероятности единственного состояния, в котором нет частиц и которой называют *вакуумом*¹⁰.

Для тождественных частиц пространство $F(\mathcal{H}_1)$ следует сузить, оставив в нём только состояния с правильной перестановочной симметрией: только чётные (для бозонов), или только нечётные (для фермионов).

Обозначим \hat{S}_+ оператор симметризации волновой функции по перестановкам частиц, а \hat{S}_- — оператор антисимметризации. Коэффициенты при симметризации/антисимметризации подберём так, чтобы эти операторы были проекторами на соответствующие подпространства:

$$\hat{S}_{\pm}^2 = \hat{S}_{\pm} = \hat{S}_{\pm}^{\dagger}.$$

Тогда из исходного пространства $F(\mathcal{H}_1)$ мы получаем *бозонное пространство Фока*, состоящее только из симметричных волновых функций

$$\hat{S}_+ F(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \hat{S}_+ \mathcal{H}_1^{\otimes n}$$

и *фермионное пространство Фока*, состоящее только из антисимметричных волновых функций

$$\hat{S}_- F(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \hat{S}_- \mathcal{H}_1^{\otimes n}.$$

¹⁰В физике используются разные неравносильные определения вакуума. Это определение — одно из них. Другое определение, которое нам встретится: *вакуум — состояние поля с минимальной энергией*.

8.5.1 Базис в бозонном пространстве Фока

Бозонное пространство Фока, состоит только из симметричных волновых функций

$$\hat{S}_+ F(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \hat{S}_+ \mathcal{H}_1^{\otimes n}.$$

Базис для пространства Фока $\hat{S}_\pm F(\mathcal{H}_1)$ может быть получен из базиса пространства $F(\mathcal{H}_1)$ действием оператора \hat{S}_\pm (симметризацией/антисимметризацией) на базисные векторы (после чего надо выкинуть все повторяющиеся и нулевые векторы, а некоторые многочастичные векторы придётся заново отнормировать на 1).

Проиллюстрируем построение базиса в бозонном пространстве Фока на примерах.

$$\begin{aligned}
 1 &\rightarrow 1 - 0\text{-частичный базисный вектор не меняется (переставлять нечего).} \\
 |k\rangle &\rightarrow |k\rangle - 1\text{-частичный базисный вектор не меняется (переставлять нечего);} \\
 \psi_k(\xi_1) &\rightarrow \psi_k(\xi_1) - \text{то же, через волновые функции.} \\
 |k\rangle \otimes |k\rangle &\rightarrow |k\rangle \otimes |k\rangle - 2\text{-ч. базисный вектор, когда частицы одном состоянии не меняется;} \\
 \psi_k(\xi_1) \psi_k(\xi_2) &\rightarrow \psi_k(\xi_1) \psi_k(\xi_2) - \text{то же, через волновые функции.} \\
 |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle &\rightarrow \frac{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle + |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle}{\sqrt{2}} - 2\text{-ч. базисный вектор, когда частицы разных состояниях;} \\
 \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) &\rightarrow \frac{\psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) + \psi_{k_2}(\xi_1) \psi_{k_1}(\xi_2)}{\sqrt{2}} - \text{то же, через волновые функции.} \\
 |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle &\rightarrow \frac{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle + |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle}{\sqrt{2}} - \text{такой вектор уже был, выбрасываем!} \\
 \psi_{k_2}(\xi_1) \psi_{k_1}(\xi_2) &\rightarrow \frac{\psi_{k_2}(\xi_1) \psi_{k_1}(\xi_2) + \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2)}{\sqrt{2}} - \text{то же, через волновые функции.} \\
 \dots &\dots
 \end{aligned}$$

Мы видим, что при переходе к бозонному пространству Фока при перестановке частиц состояние не меняется. Поэтому при нумерации базисных состояний не надо указывать какая частица в каком одночастичном состоянии находится, достаточно указать *числа заполнения*: сколько частиц находится в базисном одночастичном состоянии с данным номером. Число заполнения n_k может быть любым целым неотрицательным числом:

$$\begin{aligned}
 1 &\rightarrow \text{Частиц нет. } n_k = 0 \ \forall k. \\
 |k\rangle &\rightarrow \text{Есть 1 частица. } n_k = 1, n_{k_2} = 0 \ \forall k_2 \neq k. \\
 |k\rangle \otimes |k\rangle &\rightarrow \text{Есть 2 частицы в одном состоянии. } n_k = 2, n_{k_2} = 0 \ \forall k_2 \neq k. \\
 \frac{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle + |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle}{\sqrt{2}} &\rightarrow \text{Есть 2 частицы в разных состояниях. } n_{k_1} = n_{k_2} = 1, n_{k_3} = 0 \ \forall k_3 \notin \{k_1, k_2\}. \\
 \dots &\dots
 \end{aligned}$$

Бозонные базисные состояния нумеруются числами заполнения. Так что мы будем обозначать их следующим образом:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_k, \dots\rangle = |(n_k)\rangle - \text{все числа заполнения перечисляются в порядке возрастания } k. \quad (8.10)$$

Писать бесконечную строку числе заполнения неудобно, поэтому мы будем указывать не все числа заполнения, а только существенные, т. е. отличные от нуля, или те, которые изменяются в рассматриваемом процессе. Номера соответствующих состояний при этом будут указываться как индексы:

$$|3_5, 1_{12}, 0_{23}\rangle - 3 \text{ частицы в 5-м состоянии, 1 частица — в 12-м, 0 частиц в 23-м.}$$

При этом порядок перечисления чисел заполнения не важен:

$$|3_5, 1_{12}, 0_{23}\rangle = |1_{12}, 3_5, 0_{23}\rangle = |1_{12}, 0_{23}, 3_5\rangle.$$

Состояние

$$|0\rangle = \underbrace{|0, 0, \dots, 0, \dots\rangle}_{\text{все нули}}$$

— это состояние в котором нет частиц, т. е. *вакуумное состояние*, или просто *вакуум*.

8.5.2 Базис в фермионном пространстве Фока

Фермионное пространство Фока, состоит только из антисимметричных волновых функций

$$\hat{S}_- F(\mathcal{H}_1) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \hat{S}_- \mathcal{H}_1^{\otimes n}.$$

Проиллюстрируем построение базиса в фермионном пространстве Фока на примерах.

$$\begin{aligned}
 1 &\rightarrow 1 - 0\text{-частичный базисный вектор не меняется (переставлять нечего).} \\
 |k\rangle &\rightarrow |k\rangle - 1\text{-частичный базисный вектор не меняется (переставлять нечего);} \\
 \psi_k(\xi_1) &\rightarrow \psi_k(\xi_1) - \text{то же, через волновые функции.} \\
 |k\rangle \otimes |k\rangle &\rightarrow |k\rangle \otimes |k\rangle - |k\rangle \otimes |k\rangle = 0 - \text{нулевой вектор, выбрасываем!} \\
 \psi_k(\xi_1) \psi_k(\xi_2) &\rightarrow \psi_k(\xi_1) \psi_k(\xi_2) - \psi_k(\xi_2) \psi_k(\xi_1) = 0 - \text{то же, через волновые функции.} \\
 |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle &\rightarrow \frac{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle - |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle}{\sqrt{2}} - 2\text{-ч. базисный вектор, когда частицы в разных состояниях;} \\
 \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) &\rightarrow \frac{\psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2) - \psi_{k_2}(\xi_1) \psi_{k_1}(\xi_2)}{\sqrt{2}} - \text{то же, через волновые функции.} \\
 |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle &\rightarrow \frac{|k_2\rangle \otimes |k_1\rangle - |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle}{\sqrt{2}} - \text{такой вектор (с другим знаком) уже был, выбрасываем!} \\
 \psi_{k_2}(\xi_1) \psi_{k_1}(\xi_2) &\rightarrow \frac{\psi_{k_2}(\xi_1) \psi_{k_1}(\xi_2) - \psi_{k_1}(\xi_1) \psi_{k_2}(\xi_2)}{\sqrt{2}} - \text{то же, через волновые функции.} \\
 \dots &\dots
 \end{aligned}$$

Чтобы базис в фермионном пространстве Фока был определён однозначно надо договориться с каким знаком мы берём базисные многочастичные состояния. В приведённом выше примере надо договориться, какое из двух состояний, различающихся знаком

$$\frac{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle - |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle}{\sqrt{2}} \text{ и } \frac{|k_2\rangle \otimes |k_1\rangle - |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle}{\sqrt{2}}$$

мы включаем в базис, а какое выкидываем. Мы предположили, что $k = 0, 1, 2, \dots$, а значит мы можем постулировать, что если $k_1 < k_2$, то берём первое состояние, а если $k_1 > k_2$ — то второе.

Вообще в будем брать состояние, которое получается антисимметризацией (8.3) из того состояния $|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \otimes \dots \otimes |k_n\rangle$, в котором номера 1-частичных базисных состояний возрастают: $k_1 < k_2 < \dots < k_n$.

Мы видим, что при переходе к фермионному пространству Фока при перестановке двух частиц состояние меняет знак. Поэтому при нумерации базисных состояний не надо указывать какая частица в каком одночастичном состоянии находится, достаточно указать *числа заполнения*: сколько частиц находится в базисном состоянии с данным номером. Число заполнения n_k может быть только нулём или единицей:

$$\begin{aligned}
 1 &\rightarrow \text{Частиц нет. } n_k = 0 \ \forall k. \\
 |k\rangle &\rightarrow \text{Есть 1 частица. } n_k = 1, n_{k_2} = 0 \ \forall k_2 \neq k. \\
 |k\rangle \otimes |k\rangle &\rightarrow \text{Двух фермионов в одном состоянии не бывает. Выкидываем!} \\
 \frac{|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle - |k_2\rangle \otimes |k_1\rangle}{\sqrt{2}} &\rightarrow \text{Есть 2 частицы в разных состояниях. } n_{k_1} = n_{k_2} = 1, n_{k_3} = 0 \ \forall k_3 \notin \{k_1, k_2\}. \\
 \dots &\dots
 \end{aligned}$$

Фермионные базисные состояния нумеруются числами заполнения. Так что мы будем обозначать их следующим образом:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots, n_k, \dots\rangle = |(n_k)\rangle - \text{все числа заполнения перечисляются в порядке возрастания } k.$$

Писать бесконечную строку числе заполнения неудобно, поэтому мы будем указывать не все числа заполнения, а только существенные, т. е. отличные от нуля, или те, которые изменяются в рассматриваемом процессе. Номера соответствующих состояний при этом будут указываться как индексы:

$$|1_5, 1_{12}, 0_{23}, 1_{32}\rangle - 1 \text{ частица в 5-м состоянии, 1 частица — в 12-м, 0 частиц в 23-м, 1 — в 32-м.}$$

При этом порядок перечисления единичек (но не нулей!) определяет знак:

$$|1_5, 1_{12}, 0_{23}, 1_{32}\rangle = -| \underbrace{1_{12}, 1_5, 0_{23}, 1_{32}}_{\text{нечётная перестановка}} \rangle = -| \underbrace{1_{12}, 0_{23}, 1_5, 1_{32}}_{\text{нечётная перестановка}} \rangle = | \underbrace{0_{23}, 1_{32}, 1_5, 1_{12}}_{\text{чётная перестановка}} \rangle. \quad (8.11)$$

Состояние

$$|0\rangle = |\underbrace{0, 0, \dots, 0, \dots}_{\text{все нули}}\rangle$$

— это состояние в котором нет частиц, т. е. *вакуумное состояние*, или просто *вакуум*.

Чтобы не писать лишние единички можно ограничиться указанием номеров состояний, в которых они стоят. В повторим в этих обозначениях пример (8.11):

$$|1_5, 1_{12}, 0_{23}, 1_{32}\rangle = |5, 12, 32\rangle = -|\underbrace{12, 5, 32}_{\text{нечётная перестановка}}\rangle = -|\underbrace{12, 5, 32}_{\text{нечётная перестановка}}\rangle = |\underbrace{32, 5, 12}_{\text{чётная перестановка}}\rangle.$$

8.6 Бозонные операторы рождения и уничтожения

Если тождественные **бозоны** не взаимодействуют друг с другом, а в качестве одночастичного базиса (8.8) взят базис стационарных состояний одной частицы, то многочастичные базисные состояния в **бозонном** пространстве Фока (8.10) также оказываются стационарными. Энергия такого состояния — сумма энергий отдельных частиц:

$$E_{n_1 n_2 \dots} = \sum_{k=0}^{\infty} n_k E_k = \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\hbar \omega_k}_{E_k} n_k, \quad n_k \in \{0, 1, 2, 3, \dots\},$$

Если вспомнить энергетический спектр **гармонического осциллятора**

$$E_n^{\text{осц.}} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right),$$

то мы видим, что спектр системы тождественных невзаимодействующих бозонов устроен почти как спектр ансамбля невзаимодействующих **гармонических осцилляторов**

$$E_{n_1 n_2 \dots}^{\text{осц.}} = \sum_k \hbar \omega_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right).$$

Различие лишь в отбрасывании половинок: $n_k + \frac{1}{2} \rightarrow n_k$. Для каждого отдельного осциллятора такое отбрасывает половинки — это сдвиг нуля по шкале энергий так, чтобы основное состояние имело энергию 0. Так что, поскольку энергий определена с точностью до константы, такой сдвиг всегда можно провести и тогда спектры совпадут в точности¹¹.

Для квантовых гармонических осцилляторов существует очень удобное и красивое описание на языке **повышающих и понижающих операторов**. И это описание (с минимальными изменениями и существенной переинтерпретацией) мы можем применить к системе тождественных бозонов.

(О!) Определим операторы \hat{b}_k (*операторы уничтожения*) и $\hat{b}_k^\dagger = \hat{b}_k^+$ (*операторы рождения*). Достаточно задать, как они действуют на базисные состояния. Каждый такой оператор действует только на число заполнения с соответствующим номером, оставляя остальные неизменными:

$$\begin{aligned} \hat{b}_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_k} |n_1, n_2, \dots, n_k - 1, \dots, n_i \dots\rangle, \\ \hat{b}_k^+ |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_i \dots\rangle &= \sqrt{n_k + 1} |n_1, n_2, \dots, n_k + 1, \dots, n_i \dots\rangle. \end{aligned}$$

Оператор уничтожения \hat{b}_k уничтожает одну частицу с состоянием $|k\rangle$, а если таких частиц нет, то обнуляет вектор состояния. Оператор рождения \hat{b}_k^+ создаёт одну частицу с состоянием $|k\rangle$.

Имеют место обычные осцилляторные коммутационные соотношения:

$$[\hat{b}_{k_1}, \hat{b}_{k_2}^+] = \hat{1} \delta_{k_1 k_2}, \quad [\hat{b}_{k_1}, \hat{b}_{k_2}] = [\hat{b}_{k_1}^+, \hat{b}_{k_2}^+] = 0. \quad (8.12)$$

Операторы относящиеся к разным базисным состояниям $|k_1\rangle, |k_2\rangle$ коммутируют.

Из произведения операторов рождения и уничтожения получается оператор числа частиц в состоянии $|k\rangle$:

$$\underbrace{\hat{b}_k^+ \hat{b}_k}_{\hat{n}_k} |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_i \dots\rangle = n_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_i \dots\rangle.$$

Отсюда полное число частиц

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k = \sum_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k,$$

¹¹Правда, как правило, оказывается, что $E_{00\dots}^{\text{осц.}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2} \hbar \omega_k = \infty$, так что константа, на которую сдвигается шкала энергий оказывается бесконечной. Такое переопределение называется *перенормировкой энергии вакуума*.

а полная энергия, т. е. гамильтониан системы невзаимодействующих частиц

$$\hat{H}_{\text{незв.}} = \sum_k E_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k. \quad (8.13)$$

Если внимательно посмотреть, то окажется, что при введении операторов рождения и уничтожения отсутствие взаимодействия между частицами использовалось только для получения гамильтониана (8.13) (и для некоторых наводящих соображений). Поэтому полезно посмотреть, что будет, если сделать замену базиса в одночастичном пространстве состояний. Пусть рассмотрим два произвольных одночастичных состояния $|\kappa_1\rangle$ и $|\kappa_2\rangle$ и посмотрим, какой оператор получает их из вакуума:

$$|\kappa_1\rangle = \sum_k v_k |k\rangle = \sum_k v_k \underbrace{\hat{b}_k^+ |0\rangle}_{|k\rangle} = \underbrace{\left(\sum_{k_1} v_{k_1} \hat{b}_{k_1}^+ \right)}_{\hat{b}_{\kappa_1}^+} |0\rangle,$$

$$|\kappa_2\rangle = \sum_k w_k |k\rangle = \sum_k w_k \underbrace{\hat{b}_k^+ |0\rangle}_{|k\rangle} = \underbrace{\left(\sum_{k_2} w_{k_2} \hat{b}_{k_2}^+ \right)}_{\hat{b}_{\kappa_2}^+} |0\rangle.$$

Операторы \hat{b}_{κ_1} и \hat{b}_{κ_2} получаем эрмитовым сопряжением:

$$\hat{b}_{\kappa_1} = \sum_{k_1} v_{k_1}^* \hat{b}_{k_1}.$$

Рассмотрим коммутатор

$$[\hat{b}_{\kappa_1}, \hat{b}_{\kappa_2}^+] = \left[\sum_{k_1} v_{k_1}^* \hat{b}_{k_1}, \sum_{k_2} w_{k_2} \hat{b}_{k_2}^+ \right] = \sum_{k_1, k_2} v_{k_1}^* w_{k_2} \underbrace{[\hat{b}_{k_1}, \hat{b}_{k_2}^+]}_{\delta_{k_1 k_2}} = \sum_{k_1} v_{k_1}^* w_{k_1} = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle.$$

Также

$$[\hat{b}_{\kappa_1}, \hat{b}_{\kappa_2}] = [\hat{b}_{\kappa_1}^+, \hat{b}_{\kappa_2}^+] = 0.$$

Свойства повышающих и понижающих операторов выводились из их коммутационных соотношений, а мы теперь видим, что коммутационные соотношения (8.12) выполняются для любого ортонормированного дискретного базиса.

(!!!) Так что мы получили более общие коммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения:

$$[\hat{b}_{\kappa_1}, \hat{b}_{\kappa_2}^+] = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle, \quad [\hat{b}_{\kappa_1}, \hat{b}_{\kappa_2}] = [\hat{b}_{\kappa_1}^+, \hat{b}_{\kappa_2}] = 0. \quad (8.14)$$

Для ортонормированного дискретного базиса выполняются коммутационные соотношения (8.12)

Для ортонормированного непрерывного базиса нормировка осуществляется на дельта-функцию и мы получаем

$$[\hat{b}_{\kappa_1}, \hat{b}_{\kappa_2}^+] = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle = \delta(\kappa_1 - \kappa_2). \quad (8.15)$$

Если базис включает непрерывную и дискретную часть:

$$[\hat{b}_n, \hat{b}_k^+] = \begin{cases} \delta_{nk}, & \text{дискретный спектр,} \\ \delta(n - k), & \text{непрерывный спектр,} \\ 0, & \text{состояния из разных спектров.} \end{cases}.$$

8.7 Фермионные операторы рождения и уничтожения

Если тождественные фермионы не взаимодействуют друг с другом, а в качестве одночастичного базиса (8.8) взят базис стационарных состояний одной частицы, то многочастичные базисные состояния в **фермионном** пространстве Фока (8.10) также оказываются стационарными. Энергия такого состояния — сумма энергий отдельных частиц:

$$E_{n_1 n_2 \dots} = \sum_{k=0}^{\infty} n_k E_k = \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\hbar \omega_k}_{E_k} n_k, \quad n_k \in \{0, 1\},$$

Если вспомнить энергетический спектр **двууровневой системы**

$$E_n^{2\text{ур.}} = \hbar\omega n, \quad n \in \{0, 1\},$$

то мы видим, что спектр системы тождественных невзаимодействующих **фермионов** устроен как спектр ансамбля невзаимодействующих **двууровневых систем**.

Для квантовых двухуровневых систем существует очень удобное и красивое описание на языке **матриц спина $\frac{1}{2}$ и повышающих и понижающих проекцию спина операторов**¹² \hat{s}_\pm . И это описание (с некоторыми изменениями и существенной переинтерпретацией) мы можем применить к системе тождественных **фермионов**.

(!) Определим операторы $\hat{f}_k = \hat{f}_k^-$ (*операторы уничтожения*) и $\hat{f}_k^\dagger = \hat{f}_k^+$ (*операторы рождения*). Достаточно задать, как они действуют на базисные состояния. Каждый такой оператор действует только на число заполнения с соответствующим номером, оставляя остальные неизменными. Приведём действие операторов в случае, **когда число заполнения с номером k поставлено в начало строки (к такому порядку всегда можно привести, см. (8.11))**:

$$\begin{aligned} \hat{f}_k^- |0_k, (n_{i \neq k})\rangle &= 0 - \text{это нулевой вектор! Не путайте с вакуумом } |0\rangle, \\ \hat{f}_k^- |1_k, (n_{i \neq k})\rangle &= |0_k, (n_{i \neq k})\rangle, \\ \hat{f}_k^+ |0_k, (n_{i \neq k})\rangle &= |1, (n_{i \neq k})\rangle, \\ \hat{f}_k^+ |1_k, (n_{i \neq k})\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Здесь $(n_{i \neq k})$ — все остальные числа заполнения, они и их порядок остаются неизменными. Оператор уничтожения \hat{f}_k^- уничтожает одну частицу с состоянием $|k\rangle$, а если таких частиц нет, то обнуляет вектор состояния. Оператор рождения \hat{f}_k^+ создаёт одну частицу с состоянием $|k\rangle$.

Вместо коммутационных соотношений (которые были у бозонов) имеют место **антикоммутационные соотношения**:

$$[\hat{f}_{k_1}, \hat{f}_{k_2}^+]_+ = \hat{1} \delta_{k_1 k_2}, \quad [\hat{f}_{k_1}, \hat{f}_{k_2}]_+ = [\hat{f}_{k_1}^+, \hat{f}_{k_2}^+]_+ = 0. \quad (8.16)$$

Операторы относящиеся к разным базисным одночастичным состояниям $|k_1\rangle, |k_2\rangle$ **антикоммутируют**.

Из произведения операторов рождения и уничтожения получается оператор числа частиц в состоянии $|k\rangle$:

$$\underbrace{\hat{f}_k^+ \hat{f}_k^-}_{\hat{n}_k} |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_i \dots\rangle = n_k |n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_i \dots\rangle.$$

Отсюда полное число частиц

$$\hat{N} = \sum_k \hat{n}_k = \sum_k \hat{f}_k^+ \hat{f}_k,$$

а полная энергия, т. е. гамильтониан системы невзаимодействующих частиц

$$\hat{H}_{\text{невз.}} = \sum_k E_k \hat{f}_k^+ \hat{f}_k = \sum_k \hbar\omega_k \hat{n}_k. \quad (8.17)$$

Если внимательно посмотреть, то окажется, что при введении операторов рождения и уничтожения отсутствие взаимодействия между частицами использовалось только для получения гамильтониана (8.17) (и для некоторых наводящих соображений). Поэтому полезно посмотреть, что будет, если сделать замену базиса в одночастичном пространстве состояний. Пусть рассмотрим два *произвольных* одночастичных состояния $|\kappa_1\rangle$ и $|\kappa_2\rangle$ и посмотрим, какой оператор получает их из вакуума:

$$|\kappa_1\rangle = \sum_k v_k |k\rangle = \sum_k v_k \underbrace{\hat{f}_k^+ |0\rangle}_{|k\rangle} = \underbrace{\left(\sum_{k_1} v_{k_1} \hat{f}_{k_1}^+ \right)}_{\hat{f}_{\kappa_1}^+} |0\rangle,$$

$$|\kappa_2\rangle = \sum_k w_k |k\rangle = \sum_k w_k \underbrace{\hat{f}_k^+ |0\rangle}_{|k\rangle} = \underbrace{\left(\sum_{k_2} w_{k_2} \hat{f}_{k_2}^+ \right)}_{\hat{f}_{\kappa_2}^+} |0\rangle.$$

¹²Напомним

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{s}_+^2 = \hat{s}_-^2 = 0, \quad \hat{s}_+ \hat{s}_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- \hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad [\hat{s}_+, \hat{s}_-] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad [\hat{s}_+, \hat{s}_-]_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}_2.$$

Операторы \hat{f}_{κ_1} и \hat{f}_{κ_2} получаем эрмитовым сопряжением:

$$\hat{f}_{\kappa_1} = \sum_{k_1} v_{k_1}^* \hat{f}_{k_1}.$$

Рассмотрим **антикоммутатор**

$$[\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}^+]_+ = \left[\sum_{k_1} v_{k_1}^* \hat{f}_{k_1}, \sum_{k_2} w_{k_2} \hat{f}_{k_2}^+ \right]_+ = \sum_{k_1, k_2} v_{k_1}^* w_{k_2} \underbrace{[\hat{f}_{k_1}, \hat{f}_{k_2}^+]_+}_{\delta_{k_1 k_2}} = \sum_{k_1} v_{k_1}^* w_{k_1} = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle.$$

Также

$$[\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}]_+ = [\hat{f}_{\kappa_1}^+, \hat{f}_{\kappa_2}]_+ = 0.$$

Свойства повышающих и понижающих операторов выводились из их **антикоммутационных соотношений**, а мы теперь видим, что **антикоммутационные соотношения** (8.16) выполняются для любого ортонормированного дискретного базиса.

(!!!) Так что мы получили более общие **антикоммутационные соотношения** для операторов рождения и уничтожения:

$$[\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}^+]_+ = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle, \quad [\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}]_+ = [\hat{f}_{\kappa_1}^+, \hat{f}_{\kappa_2}]_+ = 0. \quad (8.18)$$

Для ортонормированного дискретного базиса выполняются **антикоммутационные соотношения** (8.16)

Для ортонормированного непрерывного базиса нормировка осуществляется на дельта-функцию и мы получаем

$$[\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}^+]_+ = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle = \delta(\kappa_1 - \kappa_2). \quad (8.19)$$

Если базис включает непрерывную и дискретную часть:

$$[\hat{f}_n, \hat{f}_k^+]_+ = \begin{cases} \delta_{nk}, & \text{дискретный спектр,} \\ \delta(n - k), & \text{непрерывный спектр,} \\ 0, & \text{состояния из разных спектров.} \end{cases}.$$

(Φ*) Если в паре операторов рождения и уничтожения поменять операторы местами

$$\hat{f}'_k = \hat{f}_k^+, \quad \hat{f}'^+_k = \hat{f}_k,$$

то антикоммутационные соотношения не изменятся, придётся только изменить соответствующее число заполнения:

$$n'_k = 1 - n_k \text{ т. е. } 1'_k = 0_k, \quad 0'_k = 1_k.$$

Эта перестановка соответствует тому, что вместо наличия/отсутствия частицы мы рассматриваем отсутствие/наличие дырки. С точки зрения операторов рождения и уничтожения различия между этими описаниями нет. Поэтому, если для какого-то одночастичного состояния $E_k < 0$, то можно для состояния k перейти от частицы к дырке и получить $E'_k > 0$. Такую замену мы обсуждали для отрицательных уровней энергии уравнения Дирака (см. § 7.4).

8.8 Размышление о коммутативности и антикоммутативности**

Мы привыкли, что если операторы \hat{A} и \hat{B} действуют на разные подсистемы, то они автоматически коммутируют.

Бозонные операторы рождения и уничтожения ведут себя ожидаемым образом: система разбивается на независимые подсистемы (осцилляторы) и повышающие-понижающие операторы для разных осцилляторов коммутируют друг с другом.

Фермионные операторы рождения и уничтожения нарушают наши ожидания. Мы, на самом деле, честно получили антикоммутационные соотношения для операторов, относящихся к одному базисному одночастичному состоянию, а антикоммутативность операторов для разных ячеек (базисных одночастичных состояний) была постулирована.

(???)

1. Можно ли было сохранить привычную ситуацию, когда операторы, действующие на разные подсистемы (ячейки) коммутируют?
2. Зачем мы постулировали антикоммутативность фермионных операторов для разных ячеек?

3. Мы можем рассматривать протоны и нейтроны как разные частицы, тогда протонные операторы рождения и уничтожения должны коммутировать с нейтронными операторами рождения и уничтожения. Но мы можем рассматривать протоны и нейтроны как разные состояния одной частицы — *нуклона*¹³. При таком рассмотрении протонные операторы рождения и уничтожения должны **антикоммутировать** с нейтронными операторами рождения и уничтожения. Какое из этих описаний правильно, а если правильны оба описания, то почему?

Если внимательно пересмотреть определение фермионных операторов, то мы видим, что определение легко модифицировать, сделав операторы, относящиеся к разным ячейкам, коммутативными. Для этого достаточно изменить обозначения и отказаться от перемены знака при перестановке чисел заполнения (8.11). Смена знака при перестановке чисел заполнения предполагала, что мы описываем перестановку частиц, как перестановку соответствующих чисел заполнения, но это не обязательно.

Покажем теперь, как связаны между собой фермионные операторы определённые двумя разными способами.

Начнём со случая, когда операторы, относящиеся к разным ячейкам коммутируют.

Рассмотрим три пары операторов рождения и уничтожения:

$$\hat{A}_1 = \hat{A}_1^-, \quad \hat{A}_1^+; \quad \hat{A}_2 = \hat{A}_2^-, \quad \hat{A}_2^+; \quad \hat{A}_3 = \hat{A}_3^-, \quad \hat{A}_3^+.$$

Операторы, относящиеся к одной ячейке ведут себя как обычные фермионные операторы:

$$\hat{A}_i^2 = (\hat{A}_i^+)^2 = 0, \quad [\hat{A}_i, \hat{A}_i^+]_+ = \hat{1}.$$

Операторы, относящиеся к разным ячейкам **коммутируют**:

$$[\hat{A}_1^\pm, \hat{A}_2^\pm] = 0 \Leftrightarrow \hat{A}_1^\pm \hat{A}_2^\pm = \hat{A}_2^\pm \hat{A}_1^\pm \text{ и т. д.}$$

(!) Переопределим операторы рождения и уничтожения второй пары (назовём эту процедуру *модификацией ячейки 2 с помощью ячейки 1*):

$$\hat{a}_2 = \hat{a}_2^- = \hat{A}_2(1 - \hat{n}_1) - \hat{A}_2 \hat{n}_1, \quad (8.20)$$

$$\hat{a}_2^\dagger = \hat{a}_2^+ = \hat{A}_2^+(1 - \hat{n}_1) - \hat{A}_2^+ \hat{n}_1. \quad (8.21)$$

Здесь операторы

$$\hat{n}_1 = \hat{A}_1^+ \hat{A}_1^- = \hat{n}_1^+ = \hat{n}_1^2, \quad (1 - \hat{n}_1) = \hat{A}_1^- \hat{A}_1^+ = (1 - \hat{n}_1)^\dagger = (1 - \hat{n}_1)^2$$

— это проекторы на подпространство, где в ячейке 1 есть одна частица, и на подпространство, где в ячейке 1 нуль частиц. Эти операторы коммутируют друг с другом и с $\hat{A}_2^\pm, \hat{A}_3^\pm$. Произведение этих операторов равно нулю:

$$\hat{n}_1(1 - \hat{n}_1) = 0.$$

Отличие операторов \hat{a}_2^\pm от операторов \hat{A}_2^\pm состоит в том, что операторы \hat{a}_2^\pm «смотрят» есть ли частица в ячейке 1, если частицы в ячейке нет, то в ячейку 2 просто добавляется частица, а если в ячейке 1 частица есть, то в ячейку 2 добавляется частица *и меняется знак вектора состояния*.

С учётом свойств операторов \hat{n}_1 и $(1 - \hat{n}_1)$ очевидно, что

$$\hat{a}_2^2 = (\hat{a}_2^\pm)^2 = 0, \quad [\hat{a}_2, \hat{a}_2^\pm]_+ = [\hat{A}_2, \hat{A}_2^\pm]_+ = 1, \quad \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 = \hat{A}_2^+ \hat{A}_2^- = \hat{n}_2, \quad [\hat{a}_2^\pm, \hat{A}_3^\pm] = 0, \quad [\hat{a}_2^\pm, \hat{A}_1^\pm]_+ = 0.$$

(!) \hat{a}_2^\pm по отношению к ячейке 2 ведут себя подобно операторам \hat{A}_2^\pm , т. е. как операторы рождения и уничтожения. С операторами ячейки 1 (с помощью которых мы модифицировали ячейку 2) модифицированные операторы уже **антикоммутируют**, а со операторами всех остальных ячеек (\hat{A}_3^\pm) по-прежнему **коммутируют**.

(!) Чтобы добиться того, чтобы все операторы рождения и уничтожения, относящиеся к разным ячейкам антикоммутировали друг друга надо чтобы для любой пары ячеек операторы одной были модифицированы с помощью операторов другой. Если мы нумеруем ячейки с натуральными числами, то можно договориться, что каждая ячейка модифицируется с помощью всех предыдущих.

Обратный переход от ситуации, когда операторы разных ячеек антикоммутируют, к ситуации, когда они коммутируют осуществляется полностью аналогичным образом.

Рассмотрим три пары фермионных операторов рождения и уничтожения:

$$\hat{a}_1 = \hat{a}_1^-, \quad \hat{a}_1^+; \quad \hat{a}_2 = \hat{a}_2^-, \quad \hat{a}_2^+; \quad \hat{a}_3 = \hat{a}_3^-, \quad \hat{a}_3^+.$$

¹³При таком рассмотрении протон отличается от нейтрана одним квантовым числом — *проекцией изоспина*, которая становится дополнительным двоичным аргументом одночастичной волновой функции.

Операторы, относящиеся к разным парам антисимметрически:

$$[\hat{a}_1^\pm, \hat{a}_2^\pm]_+ = 0 \Leftrightarrow \hat{a}_1^\pm \hat{a}_2^\pm = -\hat{a}_2^\pm \hat{a}_1^\pm \text{ и т. д.}$$

(!) Переопределим операторы рождения и уничтожения второй пары (используем ту же процедуру *модификации ячейки 2 с помощью ячейки 1*):

$$\hat{A}_2 = \hat{A}_2^- = \hat{a}_2(1 - \hat{n}_1) - \hat{a}_2 \hat{n}_1, \quad (8.22)$$

$$\hat{A}_2^\dagger = \hat{A}_2^+ = \hat{a}_2^+(1 - \hat{n}_1) - \hat{a}_2^+ \hat{n}_1. \quad (8.23)$$

Здесь операторы

$$\hat{n}_1 = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1, \quad (1 - \hat{n}_1) = \hat{a}_1 \hat{a}_1^\dagger$$

— это проекторы на подпространство, где в ячейке 1 есть одна частица, и на подпространство, где в ячейке 1 нуль частиц.

С учётом свойств операторов \hat{n}_1 и $(1 - \hat{n}_1)$ очевидно, что

$$\hat{A}_2^2 = (\hat{A}_2^+)^2 = 0, \quad [\hat{A}_2, \hat{A}_2^+]_+ = [\hat{a}_2, \hat{a}_2^+]_+ = 1, \quad \hat{A}_2^+ \hat{A}_2 = \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 = \hat{n}_2, \quad [\hat{A}_2^\pm, \hat{a}_3^\pm]_+ = 0, \quad [\hat{A}_2^\pm, \hat{a}_1^\pm]_+ = 0.$$

(!) \hat{A}_2^\pm по отношению к ячейке 2 ведут себя подобно операторам \hat{a}_2^\pm , т. е. как операторы рождения и уничтожения. С операторами ячейки 1 (с помощью которых мы модифицировали ячейку 2) модифицированные операторы уже **коммутируют**, а со операторами всех остальных ячеек (\hat{a}_3^\pm) по-прежнему **антисимметрически**.

(!) Чтобы добиться того, чтобы все операторы рождения и уничтожения, относящиеся к разным ячейкам коммутировали друг друга надо чтобы для любой пары ячеек операторы одной были модифицированы с помощью операторов другой. Если мы нумеруем ячейки с натуральными числами, то можно договориться, что каждая ячейка модифицируется с помощью всех предыдущих.

Мы ответили на первый вопрос: **Можно ли было сохранить привычную ситуацию, когда операторы, действующие на разные подсистемы (ячейки) коммутируют?** Как мы убедились, это было возможно!

(*) Оператор перестановки частиц в ячейках 1 и 2 для двух рассматриваемых представлений выглядит различно:

$$\hat{P}_{12} = \underbrace{\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2}_{\text{отсюда часто выводят антисимметрическость } \hat{a}_1^\pm, \hat{a}_2^\pm} = -\hat{n}_1 \hat{n}_2 = -\hat{A}_2^+ \hat{A}_2 \hat{A}_1^+ \hat{A}_1.$$

Этот оператор если частицы есть в обоих ячейках переставляет их (что приводит к умножению состояния на -1), а если в одной или обеих ячейках нет частицы, то оператор обнуляет состояние.

Но второй вопрос от этого приобрёл только большую актуальность: **Зачем мы постулировали антисимметрическость фермионных операторов для разных ячеек?** Дело в том, что мы хотим, чтобы наши коммутационные или антисимметрические соотношения не были привязаны к конкретному базису одночастичных состояний. Для фермионов именно антисимметрические соотношения удаётся написать независимым от базиса образом (8.18):

$$[\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}^+]_+ = \langle \kappa_1 | \kappa_2 \rangle, \quad [\hat{f}_{\kappa_1}, \hat{f}_{\kappa_2}]_+ = [\hat{f}_{\kappa_1}^+, \hat{f}_{\kappa_2}^+]_+ = 0.$$

(*) Раз наши **коммутационные** соотношения для фермионных операторов оказались зависимы от базиса, возникает дополнительный вопрос: **Как быть, если одночастичный базис был непрерывным?** Можно, вспомнить, что в теории множеств доказывается (с использованием аксиомы выбора), что на любом множестве существует соотношение порядка, хотя модифицировать операторы рождения и уничтожения континуальное число раз — это как-то неконструктивно.

Наконец третий вопрос: **Коммутируют или антисимметрически протонные операторы рождения и уничтожения с нейтронными, или мы можем выбирать коммутативность/антисимметрическость по своему произволу?** Мы можем сначала положить, что протонные операторы антисимметрически, а потом модифицировать каждую протонную ячейку с помощью всех нейтронных и получить набор протонных операторов, которые уже коммутируют со всеми нейтронными. Эти описания эквивалентны и одинаково удобны *до тех пор, пока нам не надо рассматривать частицы, которые представляют собой суперпозицию протона и нейтрона*. Менять базисы одночастичных состояний для протонов и нейтронов по отдельности оба описания не мешают.

8.9 Выражение наблюдаемых через операторы рождения-уничтожения*

Мы уже выражали гамильтониан системы невзаимодействующих тождественных частиц через операторы рождения и уничтожения для базиса одиночественных стационарных состояний (8.13), (8.17):

$$\hat{H}_{\text{невз.б}} = \sum_k E_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k, \quad \hat{H}_{\text{невз.Ф}} = \sum_k E_k \hat{f}_k^\dagger \hat{f}_k = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k.$$

В тех случаях, когда бозонные и фермионные операторы входят в формулы одинаково, мы, чтобы не повторять одно и то же будем писать \hat{a}^\pm имея в виду либо бозонные, либо фермионные операторы. Так обе формулы для гамильтониана системы невзаимодействующих тождественных частиц запишем как

$$\hat{H}_{\text{невз.}} = \sum_k E_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \sum_k \hbar \omega_k \hat{n}_k.$$

Для непрерывного спектра суммирование следует заменить интегрированием:

$$\hat{H}_{\text{невз.}} = \sum_{k \in \text{дискр.сп.}} E_k \underbrace{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k}_{\hat{n}_k} + \int_{\text{непр.сп.}} E_k \underbrace{\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k}_{\hat{\rho}(k)} dk.$$

В непрерывном спектре $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \hat{\rho}(k)$ — плотность числа частиц по параметру k .

Для других эрмитовых операторов ситуация аналогичная, так что для системы тождественных невзаимодействующих частиц в потенциале одиночественный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H}_{1\text{ч.}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}),$$

а гамильтониан системы

$$\hat{H}_{\text{невз.}} = \int \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_\mathbf{p}^\dagger \hat{a}_\mathbf{p} d^3\mathbf{p} + \int U(\mathbf{r}) \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger \hat{a}_\mathbf{r} d^3\mathbf{r} = \underbrace{\int \hat{a}_\mathbf{p}^\dagger \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_\mathbf{p} d^3\mathbf{p}}_{\text{эта запись для красоты}} + \underbrace{\int \hat{a}_\mathbf{r}^\dagger U(\mathbf{r}) \hat{a}_\mathbf{r} d^3\mathbf{r}}_{\text{эта запись для красоты}}.$$

Здесь мы использовали два набора операторов рождения и уничтожения: для состояний с определённым импульсом $\hat{a}_\mathbf{p}^\pm$ и для состояний с определёнными координатами $\hat{a}_\mathbf{r}^\pm$.

Часто рассматривают систему в ящике с периодическими граничными условиями, тогда импульс становится дискретным и интеграл по импульсу превращается в сумму по импульсу.

Введём теперь парное взаимодействие взаимодействие частиц (каждой с каждой) с потенциалом $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Соответствующая добавка будет уже 4-й степени по оператором рождения и уничтожения. В координатном базисе

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \iint V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\rho}(\mathbf{r}_1) \hat{\rho}(\mathbf{r}_2) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = \frac{1}{2} \iint \hat{a}_{\mathbf{r}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_1}^\dagger V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{a}_{\mathbf{r}_1} \hat{a}_{\mathbf{r}_2} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2.$$

Коэффициент $\frac{1}{2}$ нужен для избежания двойного счёта. Здесь $\hat{a}_{\mathbf{r}_1} \hat{a}_{\mathbf{r}_2}$ — оператор уничтожения пары частиц в точках \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , а $\hat{a}_{\mathbf{r}_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{r}_1}^\dagger = (\hat{a}_{\mathbf{r}_1} \hat{a}_{\mathbf{r}_2})^\dagger$ — оператор рождения такой же пары.

В импульсном базисе тот же оператор имеет вид

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \iiint \hat{a}_{\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{p}_1 + \mathbf{q}}^\dagger \tilde{V}(\mathbf{q}) \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2} d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 d^3\mathbf{q}, \quad V(\mathbf{r}) = \int \tilde{V}(\mathbf{q}) e^{i \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} d^3\mathbf{q}.$$

Здесь \mathbf{q} — переданный импульс. Суммарный импульс сохраняется, в силу того, что потенциал $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ инвариантен относительно одновременного сдвига обеих частиц.

Через операторы рождения и уничтожения можно выразить гамильтонианы, допускающие изменения числа частиц.

Член описывающий распад частицы в ячейке 1 на две частицы в ячейках 2 и 3 выглядит так

$$\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2^\dagger A_{1 \rightarrow 2,3} \hat{a}_1. \quad (8.24)$$

Но этот член не может входить в гамильтониан без эрмитово сопряженного члена, описывающего слияние частиц из ячеек 2 и 3 в ячейке 1:

$$\hat{a}_1^\dagger A_{1 \rightarrow 2,3}^* \hat{a}_2 \hat{a}_3. \quad (8.25)$$

Как мы видим, эрмитовость гамильтониана соответствует (как и обычно) обратимости эволюции замкнутой системы.

Если система не подвержена действию внешних источников, то в подобных (8.24) и (8.25) трёхчастичных членах число фермионных операторов обязательно должно быть чётным, чтобы соответствующий процесс сохранял момент импульса.

8.10 Как из двух фермионов сделать один бозон?**

Фермионы имеют полуцелый спин и для них действует принцип запрета Паули: в каждом состоянии может быть не более одного фермиона. Бозоны имеют целый спин и для них принцип запрета Паули не действует: в каждом состоянии число бозонов может быть сколь угодно велико.

Однако мы знаем, что при сложении двух полуцелых спинов суммарный спин оказывается целым и во многих случаях бозоны состоят из фермионов, но почему-то не всякая пара фермионов образует бозон:

- альфа-частица состоит из двух протонов (фермионов) и двух нейтронов (фермионов) и является бозоном,
- атом гелия состоит из альфа-частицы (бозона) и двух электронов (фермионов) и является бозоном,
- куперовская пара в сверхпроводнике состоит из двух электронов (фермионов) взаимодействующих через обмен фононами (бозонами) и является бозоном (возможна бозе-конденсация куперовских пар, приводящая к сверхпроводимости),
- пара электронов на s -оболочке в атоме имеет суммарный спин 0, но почему-то бозона не образует (и бозе конденсация таких пар в атоме невозможна).

Возникает вполне естественный вопрос:

(???) Фермионы внутри бозонов остаются фермионами и на них по-прежнему действует принцип запрета Паули. Если два бозона находятся в одинаковом состоянии, то и фермионы внутри них должны находиться в одинаковых состояниях, что запрещено. И на примере двух электронов на s -оболочке атома мы именно это и наблюдаем. Но в других случаях почему-то фермионы как-то «обходят» принцип запрета. Как вообще возможно из двух фермионов построить бозон и почему такое объединение фермионов в бозоны иногда происходит, а иногда не происходит?

Начнём с примера куперовской пары. Операторами рождения и уничтожения куперовской пары в литературе часто называют следующие комбинации электронных операторов рождения и уничтожения (допуская при этом некоторую небрежность)

$$\hat{c}_{kn} = \hat{c}_{kn}^- = \hat{f}_{kn1} \hat{f}_{kn2}, \quad \hat{c}_{kn}^\dagger = \hat{c}_{kn}^+ = \hat{f}_{kn2}^+ \hat{f}_{kn1}^+.$$

Здесь k нумерует суммарный импульс пары, n направление относительного импульса (модуль относительного импульса считаем заданным), а 1,2 нумеруют взаимоисключающие спиновые состояния (например \uparrow и \downarrow).

Операторы \hat{c}_{kn}^\pm с разными номерами коммутируют друг с другом, но бозонными операторами они быть не могут, потому, что

$$(\hat{c}_{kn}^\pm)^2 = 0.$$

И вообще при фиксированных k, n эти операторы ведут себя подобно фермионным оператором, в частности

$$[\hat{c}_{kn}, \hat{c}_{kn}^+]_+ = 1, \quad \hat{c}_{kn}^+ \hat{c}_{kn} = \hat{n}_{kn},$$

где \hat{n}_{kn} — число пар в состоянии с номерами k, n , которое может принимать значения 0 и 1. Коммутатор же операторов рождения и уничтожения пары имеет вид

$$[\hat{c}_{kn}, \hat{c}_{kn}^+] = \underbrace{\hat{c}_{kn} \hat{c}_{kn}^+}_{1 - \hat{c}_{kn}^+ \hat{c}_{kn}} - \hat{c}_{kn}^+ \hat{c}_{kn} = 1 - 2\hat{n}_{kn}.$$

При малых средних числах заполнения он, конечно, близок к бозонному коммутатору, но настоящие бозонные операторы должны работать при больших числах заполнения (для бозе-конденсации числа заполнения должны быть *макроскопически большими*).

Операторы рождения и уничтожения бозонов тем не менее могут быть построены из операторов \hat{c}_{kn}^\pm . Рассмотрим оператор¹⁴, создающий пару в суперпозиции N состояний k, n с фиксированным k :

$$\hat{b}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{c}_{kn}, \quad \hat{b}_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{c}_{kn}^+. \quad (8.26)$$

Операторы \hat{b}_k^\pm с разными значениями k коммутируют, посмотрим теперь коммутатор

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_k^+] = \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{c}_{kn}, \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \hat{c}_{kn}^+ \right] = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N [\hat{c}_{kn}, \hat{c}_{kn}^+] = 1 - 2 \frac{\sum_{n=1}^N \hat{n}_{kn}}{N}.$$

¹⁴Если квантовое число n пробегает непрерывный спектр, то вместо суммы следует взять интеграл.

При $N \rightarrow \infty$ если суммарное число заполнения $\hat{n}_k = \sum_{n=1}^N \hat{n}_{kn}$ мало¹⁵ (равно $o(N)$) в пределе мы получаем бозонные коммутационные соотношения

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+] = \delta_{kk'}.$$

Таким образом в «настоящей» (бозонной) куперовской паре относительный импульс определён только по модулю.

(*) Мы выразили операторы \hat{b}_k^\pm через операторы \hat{c}_{kn}^\pm , но операторы \hat{c}_{kn}^\pm не могут быть выражены через \hat{b}_k^\pm . Это ясно из того, что любые операторы $\hat{b}_{|\psi\rangle}^\pm$ должны быть бозонными (см. (8.14)), а операторы \hat{c}_{kn}^\pm бозонными не являются.

(Ф) Принцип запрета Паули не мешает парам находиться в одном состоянии так как фермион внутри пары определённого состояния не имеет, что проявляется в том, что операторы \hat{b}_k^\pm не могут быть разложены в произведение двух фермионных операторов. Минимальное число слагаемых в суперпозиции N (назовём его *рангом суперпозиции*, по аналогии с рангом матрицы) задаёт максимальную степень, в которую можно возвести операторы \hat{b}_k^\pm , чтобы они ещё не обнулились.

$$(\hat{b}_k^\pm)^{N+1} = 0.$$

(Ф?) Что в нашем рассмотрении куперовской пары является общим для всех случаев построения бозона из фермионов, а что относится к специфике данной системы? k — суммарный импульс пары, а в общем случае k — набор квантовых чисел, описывающих состояние бозона. n — направление относительного импульса, а в общем случае n — квантовые числа, нумерующие слагаемые в суперпозиции. 1 и 2 — проекции спинов двух электронов, а в общем случае — скоррелированные квантовые числа в суперпозиции фермионов. N — минимальное число слагаемых в разложении суперпозиции на тензорные произведения состояний отдельных фермионов (*ранг суперпозиции*), для получения бозона из фермионов обязательно $N = \infty$.

(!) Подробнее о *ранге суперпозиции*. Ранг матрицы — число линейно-независимых строк (или столбцов). Матрица ранга 1 может быть представлена как произведение столбца на строку. Матрица ранга N может быть представлена как сумма не менее чем N произведений столбцов на строки. Функция двух переменных может рассматриваться как матрица (возможно бесконечная) в роли индексов которой выступают две переменные. Индексы такой матрицы-функции могут быть как дискретными, так и непрерывными. Аналогом матрицы ранга 1 является функция, вида $\psi(x, y) = \alpha(x) \beta(y)$. Аналогом матрицы ранга N является функция, представимая как сумма не менее чем N произведений вида $\alpha_n(x) \beta_n(y)$. Поскольку суммы волновых функций мы называем суперпозициями, число N мы будем называть *рангом суперпозиции*. Если оператор создаёт или уничтожает системы в состоянии с рангом суперпозиции N , то оператор рождения или уничтожения такого состояния разлагается на не менее чем N слагаемых, каждое из которых имеет вид произведения операторов рождения или уничтожения. Так что операторы вида (8.26) мы будем называть операторами уничтожения и рождения с рангом суперпозиции N .

Мы разобрались почему куперовская пара всё-таки бозон, также стало понятно почему пара s -электронов бозона не образует (для пары s -электронов $N = 1$). Открытыми остаются вопросы с альфа-частицей и атомом гелия.

Здесь нам надо сослаться на условия, при которых выводится теорема о связи спина со статистикой. Эта теорема предполагает лоренц-инвариантность. Для пары s -электронов лоренц-инвариантность нарушается существованием выделенной системы отсчёта связанный с ядром. Существование альфа-частицы и атома гелия от системы отсчёта не зависит и они попадают под условия теоремы о связи спина со статистикой. Понятно, что если разложить операторы рождения и уничтожения атома гелия или альфа-частицы по фермионным операторам, то мы должны получить суперпозицию произведений с бесконечным рангом N .

¹⁵Для этого можно потребовать чтобы средняя энергия была конечной.

Глава 9

Сложный атом

Как в классической, так и в квантовой механике задача двух тел решается аналитически, а уже с задачей трёх тел возникают сложности. Поэтому уже начиная с атома гелия (три тела: ядро и два электрона) приходится обращаться к приближённым методам, таким как вариационный метод, численные вычисления, теория возмущений, приближение среднего поля и их комбинации.

В квантовой механике задача многих тел осложняется быстрым ростом количества информации, необходимого для описания системы с ростом числа частиц: в классике надо для N частиц задать $6N$ чисел (координат и импульсов) и количество информации растёт линейно с N , в квантовой механике для N частиц надо задать волновую функцию от $3N$ переменных и количество информации растёт экспоненциально (если положить по 100 узлов решётки на каждую координатную ось, то добавление 1 частицы увеличивает число узлов в 100^3 раз). По этой причине бездумный численный счёт для многочастичных квантовых систем оказывается невозможным: прежде чем переходить к численным вычислениям приходится упрощать задачу, чтобы она могла за разумное время считаться на компьютере с конечной памятью.

9.1 Вариационный принцип* → КПКМ-4.11

См. книгу М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику», § 4.11 «Вариационный принцип» (стр. 128).

9.2 Вариационный метод для атома гелия

Гамильтониан — самосопряжённый оператор, для него можно решить спектральную задачу (стационарное уравнение Шрёдингера) и получить набор собственных чисел и ортонормированный базис собственных функций, по которому разложить произвольное состояние ψ :

$$|\psi\rangle = \sum_{E,i} |\phi_{Ei}\rangle \langle \phi_{Ei}|\psi\rangle + \int \sum_i |\phi_{Ei}\rangle \langle \phi_{Ei}|\psi\rangle dE.$$

Здесь сумма по E берётся по дискретному спектру, а интеграл — по непрерывному, индекс i нумерует базисные векторы с одинаковой энергией.

Если состояние ψ нормировано на 1, то средняя энергия оказывается средним взвешенным (с весом $\sum_i |\langle \phi_{Ei}|\psi\rangle|^2$) собственных уровней энергии

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_E E \underbrace{\sum_i |\langle \phi_{Ei}|\psi\rangle|^2}_{p_E} + \int E \underbrace{\sum_i |\langle \phi_{Ei}|\psi\rangle|^2}_{\rho(E)} dE.$$

Если среди уровней энергии есть минимальный (основной уровень) E_0 , то среднее не может быть меньше чем E_0 , причём оно строго равно E_0 только с том случае, если всё распределение вероятностей сосредоточено в одной точке, т. е. ψ — собственный вектор с собственным числом E_0 .

На основе этой идеи в предыдущем параграфе мы строим соответствующий вариационный принцип (точный), а здесь, рассмотрим вариационный метод (приближённый) нахождения основного состояния.

Для этого мы рассматриваем семейство пробных функций $\psi_\lambda = \psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}$ и ищем на них минимум средней энергии для заданного гамильтониана:

$$E_0 \lesssim E(\lambda) = \min_\lambda \frac{\langle \psi_\lambda | \hat{H} | \psi_\lambda \rangle}{\langle \psi_\lambda | \psi_\lambda \rangle}.$$

Для вариационного принципа минимум брался по всем ненулевым векторам и получалось строгое равенство. В вариационном методе берётся условный минимум по поверхности состояний заданной параметрически как $\psi_\lambda = \psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}$. Понятно, что условный минимум не может быть меньше глобального, поэтому вариационный метод всегда даёт *оценку сверху* на энергию основного состояния.

Вариационный метод определяет наилучшее приближение к основному состоянию данного гамильтониана на поверхности $\psi_{\lambda_1, \dots, \lambda_n}$.

Для любого вектора состояния ψ_λ можно подобрать такой гамильтониан \hat{H}_λ , для которого ψ_λ будет основным состоянием. Если параметры λ_{\min} доставляют минимум функции $E(\lambda)$, мы можем представить исходный гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \underbrace{\hat{H}_{\lambda_{\min}}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{(\hat{H} - \hat{H}_{\lambda_{\min}})}_{\hat{V}}.$$

После чего воспользоваться теорией возмущения.

Пример¹. Рассмотрим атом гелия в простейшем приближении, как два электрона в поле ядра, отталкивающихся друг от друга по закону Кулона:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Ясно, что каждый электрон экранирует для другого часть заряда ядра, поэтому хочется рассмотреть приближённый гамильтониан, в котором взаимодействие электронов друг с другом учтено изменением эффективного заряда ядра ($1 < Z < 2$):

$$\hat{H}_Z = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_2|}.$$

Как подобрать оптимальную величину Z ? Для гамильтониана \hat{H}_Z электроны не взаимодействуют друг с другом. Спектр гамильтониана \hat{H}_Z находится точно как сумма энергий двух электронах в водородоподобных ионах с зарядом ядра Ze . Нормированная двухэлектронная волновая функция основного состояния гамильтониана $\hat{H}(Z)$

$$\psi_Z(r_1, r_2) = \frac{Z^3}{\pi a_B^3} \exp\left(-Z \frac{r_1 + r_2}{a_B}\right), \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2},$$

Мы можем вычислить (аналитически)

$$E(Z) = \langle \psi_Z | \hat{H} | \psi_Z \rangle$$

и найти минимум $E(Z)$. Значение Z_{\min} доставляющее этот минимум — оптимальное значение Z (*для нахождения основного состояния*, в других случаях оптимальное Z может быть другим).

$$\begin{aligned} E(Z) &= \frac{e^2}{a_B} \left[Z^2 - \frac{27}{8} Z \right], \quad E'(Z_{\min}) = \frac{e^2}{a_B} \left[2Z_{\min} - \frac{27}{8} \right] = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \quad Z_{\min} &= \frac{27}{16} = 1,6875, \quad E(Z_{\min}) = -\frac{e^2}{a_B} \left(\frac{27}{16} \right)^2 = -2,84765625 \frac{e^2}{a_B}. \end{aligned}$$

Так что для нахождения основного уровня энергии удобно представить гамильтониан атома гелия в следующем виде:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{\frac{27}{16}e^2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{\frac{27}{16}e^2}{|\mathbf{r}_2|}}_{\hat{H}_0} - \underbrace{\frac{\frac{5}{16}e^2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{\frac{5}{16}e^2}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}_{\hat{V}}$$

Энергия $E(Z_{\min}) = \langle \psi_{Z_{\min}} | \hat{H}_0 + \hat{V} | \psi_{Z_{\min}} \rangle$ при этом соответствует энергии основного состояния с точностью до первого порядка теории возмущений. Второй порядок теории возмущений всегда даёт отрицательную поправку к энергии основного состояния (см. (1.36)), что согласуется с тем, что вариационный метод всегда даёт завышенную оценку основного уровня энергии².

$E(Z = 2) = -\frac{11}{4} \frac{e^2}{a_B} = -2,75 \frac{e^2}{a_B}$ соответствует энергии основного состояния атома гелия с точностью до первой поправки теории возмущений, которую мы получим, если отнесём к возмущению только взаимодействие между электронами:

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\mathbf{r}_2|}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}_{\hat{V}}.$$

¹См. задачу из задания.

²Кроме тех исключительных счастливых случаев, когда точная волновая функция попала в число пробных функций ψ_λ .

Видно, что такое разбиение гамильтониана на невозмущённую часть и возмущение хуже: оценка сверху в $-2,75$ хуже, чем оценка сверху $-2,84765625$.

(!) Рассмотренный пример представляет собой простейший случай *приближения среднего поля*, когда взаимодействие между частицами заменяется взаимодействием с некоторым средним полем, вклад в которое даёт каждая частица. Применительно в атому гелия мы могли бы сделать модель более точной, если бы описывали среднее поле не кулоновским потенциалом $-\frac{Ze^2}{r}$, а более сложным потенциалом $U(r)$.

9.3 Атом гелия

Обсудим в первом порядке теории возмущений структуру уровней гелиеподобного атома.

$$\hat{H} = \underbrace{\underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1}}_{\hat{H}_1} + \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2}}_{\hat{H}_2}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}_{\hat{V}}.$$

Мы не собираемся ограничиваться основным состоянием, поэтому приведённое выше вычисление эффективного заряда здесь не подходит, а вычислять свой эффективный заряд для каждого уровня — слишком громоздко. Поэтому в этот раз мы разбили гамильтониан на невозмущённую часть \hat{H}_0 и возмущение \hat{V} самым простым образом, отнеся к возмущению только взаимодействие электронов между собой.

Гамильтонианы $\hat{H}_{1,2}$ — имеют вид гамильтониана водородоподобного атома, задачу на собственные числа и собственные функции которого мы уже исследовали. Это позволяет выписать невозмущённые волновые функции и уровни энергии:

$$E_{n_1 n_2}^{(0)} = -\frac{Z^2 m e^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} \right) = -\frac{Z^2 e^2}{2a_B} \left(\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} \right), \quad n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

$$\begin{aligned} \psi_{n_1 l_1 m_{l_1} m_{s_1}; n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2}}^{(0)}(r_1, \theta_1, \phi_1, m_1^s; r_2, \theta_2, \phi_2, m_2^s) &= \psi_{n_1 l_1 m_{l_1} m_{s_1}}(r_1, \theta_1, \phi_1, m_1^s) \psi_{n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2}}(r_2, \theta_2, \phi_2, m_2^s) = \\ &= \phi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(r_1, \theta_1, \phi_1) \underbrace{\chi_{m_{s_1}}(m_1^s)}_{\delta_{m_{s_1} m_1^s}} \phi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(r_2, \theta_2, \phi_2) \underbrace{\chi_{m_{s_2}}(m_2^s)}_{\delta_{m_{s_2} m_2^s}}. \end{aligned}$$

Волновые функции $\psi_{n_1 l_1 m_{l_1} m_{s_1}; n_2 l_2 m_{l_2} m_{s_2}}^{(0)}$ не обладают правильной перестановочной симметрией, поэтому мы перейдём к другому базису невозмущённых состояний, при этом удобно представить волновую функцию в виде произведения координатной и спиновой частей. Спиновые волновые функции выберем в виде состояний с определённым суммарным спином S .

$$\psi_{n_1 l_1 m_{l_1}; n_2 l_2 m_{l_2}; S, M_S}^{(0)} = C \{ \phi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(\mathbf{r}_1) \phi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(\mathbf{r}_2) + (-1)^S \phi_{n_2 l_2 m_{l_2}}(\mathbf{r}_1) \phi_{n_1 l_1 m_{l_1}}(\mathbf{r}_2) \} \chi_{S M_S}.$$

Здесь C — нормировочный множитель. $C = \frac{1}{2}$ если если координатные волновые функции двух электронов совпадают ($n_1 = n_2$, $l_1 = l_2$, $m_{l_1} = m_{l_2}$, в этом случае допустимо только $S = 0$), или $C = \frac{1}{\sqrt{2}}$ если координатные волновые функции двух электронов различаются (в этом случае допустимы и $S = 0$ и $S = 1$).

Спиновая волновая функция $\chi_{S M_S}(m_1^s, m_2^s)$ симметрична по отношению к перестановке электронов при $S = 1$ и антисимметрична при $S = 0$, т. е. спиновая чётность равна $(-1)^{S+1}$, поэтому чётность координатной волновой функции определяется как $(-1)^S$, чтобы общая чётность была -1 .

Первая поправка к основному состоянию

$$E_{11}^{(1)} = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_B}.$$

Мы видим, что первая поправка мала по сравнению с невозмущённым уровнем энергии, хотя на хорошую точность в первом порядке теории возмущений лучше не рассчитывать, но для качественных оценок точность приемлема:

$$\left| \frac{E_{11}^{(1)}}{E_{11}^{(0)}} \right| = \frac{5}{8Z} \geq \frac{5}{16} = 0,3125.$$

Уровни $E_{n_1 n_2}^{(0)}$ расщепляются за счёт обменного члена

$$E_{n_1 l_1 m_{l_1} n_2 l_2 m_{l_2} S}^{(1)} = K + (-1)^S J$$

Здесь первый член соответствует кулоновскому взаимодействию плотностей зарядов двух электронов (8.6)

$$K = \int \rho_1(\mathbf{r}_1) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \rho_2(\mathbf{r}_2) > 0, \quad (9.1)$$

а второй член — обменный (8.7) (присутствует только при $\phi_1 \neq \phi_2$)

$$\begin{aligned} J &= \int \underbrace{\phi_1^*(\mathbf{r}_1) \phi_2(\mathbf{r}_1)}_{\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \underbrace{\phi_2^*(\mathbf{r}_2) \phi_1(\mathbf{r}_2)}_{\rho_{\text{обм.}}^*(\mathbf{r}_2)} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = \\ &= \int \text{Re}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \text{Re}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_2)) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 + \\ &\quad + \int \text{Im}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_1)) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \text{Im}(\rho_{\text{обм.}}(\mathbf{r}_2)) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 > 0. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Таким образом, невозмущённые уровни энергии расщепляются по суммарному спину: состояния с $S = 0$ получают большую добавку $K + J$ (кроме случая $n_1 = n_2, l_1 = l_2, m_{l1} = m_{l2}$, когда нет обменного члена и поправка равна K), а состояния с $S = 1$ меньшую поправку $K - J$.

(Ф) Может показаться странным, что гамильтониан, не зависящий от спина даёт расщепление по спину, но на самом деле тут сказывается не сам спин, а перестановочная симметрия координатной волновой функции.

(Ф*) Если бы вместо двух электронов мы взяли две одинаковые, но не тождественные частицы, то расщепление за счёт обменного члена всё равно имело бы место, но не было бы связано со спином (спин только создавал бы дополнительное вырождение уровней энергии), и появились бы дополнительные уровни энергии, для которых волновые функции были бы чётными по отношению к перестановки двух частиц $\psi(\xi_1, \xi_2) = +\psi(\xi_2, \xi_1)$.

9.4 Сложный атом

Выпишем гамильтониан сложного атома без учёта спина электронов и пренебрегая движением ядра:

$$\hat{H} = \sum_a \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_a} \right) + \sum_{a < b} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}.$$

Исследовать этот гамильтониан мы будем методом теории возмущений, а для выделения невозмущённого гамильтониана используем метод среднего поля

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_a \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_a} + \varphi(r_a) \right)}_{\hat{H}_0 = \sum_a \hat{H}_a} + \underbrace{\left(\sum_{a < b} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} - \sum_a \varphi(r_a) \right)}_{\hat{V}}. \quad (9.3)$$

Среднее поле $\varphi(r)$ мы считаем общим для всех электронов и сферически симметричным (для удобства нахождения уровней). Подходящий потенциал среднего поля $\varphi(r)$ можно искать с помощью вариационного метода (возможно с применением численных методов), или другими способами.

9.4.1 Одноэлектронный базис (спектроскопические символы)

Все невозмущённые одночастичные гамильтонианы $\hat{H}_a = \hat{1} \otimes \cdots \otimes \hat{H}_{1\text{ч}} \otimes \cdots \otimes \hat{1}$ устроены одинаково, только действуют на степени свободы для разных электронов.

Спектральная задача для одночастичного гамильтониана $\hat{H}_{1\text{ч}}$ — это обычная задача о движении частицы в центрально-симметричном поле. Уровни энергии нумеруются орбитальным квантовым числом l и радиальным квантовым числом (число внутренних нулей радиальной волновой функции) n_r . По магнитному квантовому числу m_l имеется $(2l+1)$ -кратное вырождение. Также 2-кратное вырождение имеется по проекции спина m_s . Вместо радиального квантового числа традиционно используется главное квантовое число $n = n_r + l + 1$. Если среднее поле $\varphi(r) \neq \frac{\text{const}}{r}$, то кулоновское вырождение по l отсутствует и уровень энергии зависит не только от n , но и от l .

$$\hat{H}_{1\text{ч}} \psi_{nlm_lm_s} = \mathcal{E}_{nl} \psi_{nlm_lm_s}.$$

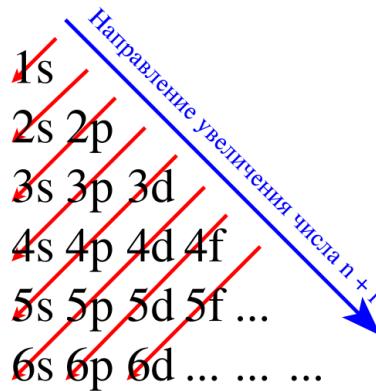


Рис. 9.1: Правило Клечковского

Волновая функция раскладывается на три множителя: радиальный, угловой и спиновый

$$\psi_{nlm_lm_s}(r, \theta, \phi, m^s) = R_{ln}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \underbrace{\chi_{m_s}(m^s)}_{\delta_{m_s m^s}}. \quad (9.4)$$

(О) Все одночастичные состояния с заданными n, l называют *электронной оболочкой*.

В электронной оболочке n, l имеется $2(2l + 1)$ электронное состояние. В соответствии с принципом запрета Паули $2(2l + 1)$ — максимальное число электронов, которые могут находиться на данной оболочке.

(О) Если на данной оболочке имеется максимальное число электронов, то она называется *замкнутой оболочкой*.

Электронные оболочки принято обозначать *спектроскопическими символами*, где n обозначается числом, а l — буковой:

l	0	1	2	3	...
символ	s	p	d	f	далее по алфавиту

Например, $2s - n = 2, l = 0$,

$3p - n = 3, l = 1$,

$1p$ — такой символ невозможен, т. к. p означает $l = 1$, а значит $n = n_r + l + 1 \geq 2$.

9.4.2 Периодический закон**

Для атома водорода энергия электрона нумеруется главным квантовым числом $n = n_r + l + 1$. Для сложного атома это не так из-за взаимодействия электронов между собой.

(!) Для сложного атома энергия электрона лучше нумеруются суммой $N = n + l = n_r + 2l + 1$. При равном значении $N = n + l$ меньшую энергию имеет состояние с меньшим n (см. рис. 9.1). Это *приближённое правило* называется *правилом Клечковского* (преимущественно в русской и французской литературе, а также *правилом Маделунга, правилом n + l, диагональным правилом* и т. д.).

Правило Клечковского много раз получалось разными физиками и химиками. Оно было впервые сформулировано Нильсом Бором в начале 1920-х. В. М. Клечковский³ вывел правило из модели Томаса–Ферми⁴ в 1951 году.

(!) Спор о том, как правильно называть правило $n + l$ имеет простое решение. Правильное название — *периодический закон* Д. И. Менделеева в терминах квантовой механики. $N = n + l$ — это почти номер длинного периода в таблице Менделеева. Точнее номер периода для $l = 0$ равен $N = n$, а для остальных орбитальных моментов — $N - 1$.

В 1971 году Ю. Н. Демков и В. Н. Островский получили правило Клечковского из модельного потенциала, который на малых расстояниях от ядра близок к кулоновскому, а на больших расстояниях учитывает взаимодействие электронов:

$$U_{1/2}(r) = -\frac{2v}{rR(r + R)^2}, \quad v = \text{const}, \quad R = \text{const}.$$

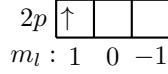
Снова речь идёт о разновидностях приближения среднего поля.

³Всеволод Маврикиевич Клечковский (1900–1972). Советский агрохимик. Основное направление исследований — применение метода меченых атомов.

⁴Квазиклассическая модель, рассматривающая электроны в атоме как Ферми-жидкость. Может рассматриваться как разновидность приближения среднего поля.

На основе правила Клечковского рисуют схемы, где разным одноэлектронным состояниям соответствуют клеточки (или полочки-уровни), в которые можно помещать стрелки \uparrow и \downarrow , изображающие электроны со спином направленным вверх или вниз (см. рис. 9.2).

На приведённой на рис. 9.2 энергетической диаграмме каждой клеточке соответствуют два одноэлектронных состояния отличающиеся направлением спина. При заданных n и l клеточки нумеруются магнитным квантовым числом m_l в порядке убывания:



Один электрон на $2p$ -оболочке, $m_s = +\frac{1}{2}$, $m_l = +1$

Правило Клечковского является приближённым. Это связано с тем, что при добавлении очередного электрона потенциал среднего поля перестраивается и не всегда при этом сохраняется порядок уровней. Поэтому из правила Клечковского есть ряд исключений, когда при переходе к следующему атому в таблице Менделеева ранее заполненные одноэлектронные состояния освобождаются. Эти сравнительно небольшие перестройки распределения электронов по оболочкам влияют на химические свойства элементов не сильно и структуру таблицы Менделеева не нарушают (см. рис. 9.3).

9.4.3 Базис-1 (конфигурации)

Многочастичные волновые функции нулевого приближения обладающие правильной перестановочной симметрией задаются в форме определителя Слэтера (8.3)

$$\psi_{[k_1 k_2 \dots k_N]}^{(0)}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{k_1}(\xi_1) & \psi_{k_2}(\xi_1) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_1) \\ \psi_{k_1}(\xi_2) & \psi_{k_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_1}(\xi_N) & \psi_{k_2}(\xi_N) & \dots & \psi_{k_N}(\xi_N) \end{pmatrix}, \quad k_a = (n_a, l_a, m_{la}, m_{sa}). \quad (9.5)$$

В наборе состояний k_1, k_2, \dots, k_N нет двух одинаковых, иначе определитель обращается в нуль.

(О) Электронной конфигурацией называют совокупность спектроскопических символов, задающих распределение электронов по оболочкам. Символы принято перечислять в порядке возрастания n , а при заданном n в порядке возрастания l , если символы повторяются, то это обозначают как степень. Например, следующая конфигурация соответствует основному состоянию натрия (см. рис. 9.4)

$$\gamma = 1s^2 2s^2 2p^6 3s.$$

Здесь $1s^2$ — 2 s -электрона ($l = 0$) при $n = 1$ (замкнутая оболочка),
 $2s^2$ — 2 s -электрона ($l = 0$) при $n = 2$ (замкнутая оболочка),
 $2p^6$ — 6 p -электронов ($l = 1$) при $n = 2$ (замкнутая оболочка),
 $3s^1$ — 1 s -электрон ($l = 0$) при $n = 3$ (незамкнутая оболочка, валентный электрон).
Полное число электронов: $2 + 2 + 6 + 1 = 11$.

Волновая функция вида (9.5) задаётся электронной конфигурацией γ (все n_a, l_a) и проекциями орбитальных и спиновых моментов:

$$|\psi_{[k_1 k_2 \dots k_N]}^{(0)}\rangle = |\gamma; m_{l1}, m_{s1}; m_{l2}, m_{s2}; \dots; m_{lN}, m_{sN}\rangle. \quad (9.6)$$

Такие волновые функции образуют *Базис-1*.

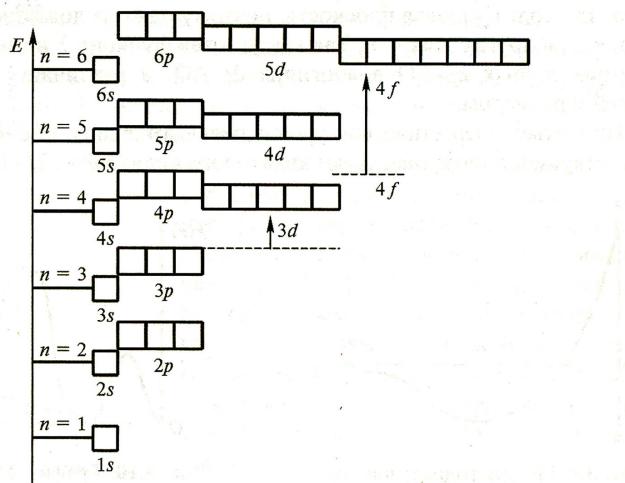
(*) Каждому базисному вектору из Базиса-1 соответствует некоторый набор стрелок (см., например, рис. 9.4), расставленных в клетки диаграммы 9.2. Если вспомнить фермионное пространство Фока, то каждой клетке диаграммы соответствуют два числа заполнения. Число заполнения равно 1, если в соответствующей клетке стоит стрелка с соответствующей ориентацией, или 0, если в соответствующей клетке нет такой стрелки.

Волновая функция (9.5) является собственной для гамильтониана \hat{H}_0 с энергией

$$E_{\gamma}^{(0)} = E_{k_1 k_2 \dots k_N}^{(0)} = \sum_{a=1}^N \mathcal{E}_{k_a} = \sum_{a=1}^N \mathcal{E}_{n_a l_a}.$$

Большинство таких уровней энергии оказываются вырожденными по m_{la}, m_{sa} , за исключением конфигураций в которых все непустые электронные оболочки замкнуты.

(!) В силу сферической симметрии замкнутая оболочка даёт нулевой вклад в полный спин и в полный орбитальный момент.



Энергетическая диаграмма АО для многоэлектронных атомов

Рис. 9.2: Диаграмма одноэлектронных состояний. Масштаб по энергии не соблюден, важен лишь порядок. Если отразить диаграмму по вертикали и удвоить каждую клетку, то в этой диаграмме можно узнать таблицу Менделеева

Рис. 9.3: Таблица Менделеева с указанием последней заполняемой оболочки. Сравните с рис. 9.2. Буква “о” в виде правого верхнего индекса спектрального терма означает, что состояние нечётно, т. е. $(-1)^{\sum_a l_a} = -1$

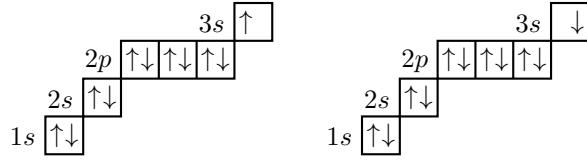


Рис. 9.4: Две диаграммы, соответствующие двум векторам Базиса-1 для электронной конфигурации основного состояния натрия $\gamma = 1s^2 2s^2 2p^6 3s$

Подпространство собственных состояний гамильтониана \hat{H}_0 с энергией $E_\gamma^{(0)}$ мы будем обозначать \mathcal{H}_γ . Оно натянуто на состояния Базиса-1 (9.6) с фиксированной электронной конфигурацией γ .

Для построения теории возмущений с вырожденными невозмущёнными уровнями энергиями нам надо в первую очередь определить *правильные волновые функции нулевого приближения* (см. § 1.3 «Вырожденный спектр»).

Возмущение \hat{V} частично снимет вырождение спектра невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 , но некоторое вырождение (связанное с симметриями полного гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$) останется⁵.

9.4.4 Базис-2 (термы)

Базис-1 симметричен по отношению к поворотам координатных и спиновых волновых степеней свободы отдельных электронов. Он одновременно диагонализует операторы \hat{l}_a^2 , \hat{l}_{za} , \hat{s}_a^2 , \hat{s}_{za} , которые коммутируют с \hat{H}_0 и между собой.

Возмущение \hat{V} (9.3) частично нарушает эти симметрии. Оно позволяет по-отдельности вращать спиновые степени свободы отдельных электронов, но координатные степени свободы теперь можно вращать только все вместе. Генераторами вращений всех координатных степеней свободы являются проекции суммарного орбитального момента

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_a \hat{\mathbf{l}}_a.$$

Соответствующие коммутирующие с $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ наблюдаемые — $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z , их собственные числа $L(L+1)$ и $M_L \in \{-L, -L+1, \dots, +L\}$.

Рассматриваемый гамильтониан не действует на спиновые степени свободы, но при перестановочная симметрия координатной волновой функции связана с перестановочной симметрией спиновой волновой функции, поэтому для спина также переходят к суммарному моменту:

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_a \hat{\mathbf{s}}_a.$$

Соответствующие коммутирующие с $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ наблюдаемые — $\hat{\mathbf{S}}^2$ и \hat{S}_z , их собственные числа $S(S+1)$ и $M_S \in \{-S, -S+1, \dots, +S\}$.

(О) Операторы $\hat{\mathbf{L}}^2$, \hat{L}_z , $\hat{\mathbf{S}}^2$, \hat{S}_z диагонализуются в новом базисе, который назовём *Базисом-2*:

$$|\gamma; L, M_L; S, M_S\rangle$$

Возмущение (9.3) в Базисе-2 оказывается диагональным.

Возмущение \hat{V} частично снимает вырождение уровней $E_\gamma^{(0)}$, но остаётся вырождение связанное с симметрией суммарного гамильтониана по отношению к одновременному повороту всех координатных степеней свободы (вырождение по M_L) и вырождение, связанное с симметрией по отношению к одновременному повороту всех спиновых степеней свободы (вырождение по M_S). Общее вырождение оказывается $(2L+1)(2S+1)$ -кратным.

С точностью до первого порядка теории возмущений

$$E_{\gamma LS} = E_\gamma^{(0)} + E_{\gamma LS}^{(1)}.$$

$$E_{\gamma LS}^{(1)} = \langle \gamma; L, M_L; S, M_S | \hat{V} | \gamma; L, M_L; S, M_S \rangle.$$

Такие образом, подпространство $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ собственных векторов гамильтониана⁶ $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ имеет раз мерность $(2L+1)(2S+1)$.

⁵В дальнейшем к возмущению \hat{V} из (9.3) мы будем добавлять другие возмущения. Это будут члены, которыми мы первоначально пренебрегли, а также члены связанные с внешними полями.

⁶Этот гамильтониан всё ещё нельзя считать полным, поскольку он не учитывает спин-орбитальное взаимодействие, дарвиновский член, релятивистскую поправку к кинетической энергии, спин-спиновое взаимодействие и другие релятивистские эффекты.

(О) Каждому подпространству $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ сопоставляется *спектроскопический терм*. Терм обозначается ${}_{2S+1}^L L$, где L — спектроскопический символ, обозначающий суммарный орбитальный момент L , который в этом случае обозначает большой буквой:

L	0	1	2	3	...
символ	S	P	D	F	далее по алфавиту

Если все непустые оболочки полностью замкнуты, то автоматически кратность $E_{\gamma}^{(0)}$ равна 1, а значит $S = L = 0$ и есть единственный терм 1S . Поэтому при построении термов на замкнутые оболочки можно не обращать внимание: они не вносят вклад ни в L , ни в S . По этой причине при записи электронной конфигурации полностью замкнутые оболочки часто опускают.

Примеры термов.

1) Рассмотрим конфигурации $n_1p\ n_2p$ ($n_1 \neq n_2$). Соответствующая кратность $6 \times 6 = 36$. Два p -электрона на разных оболочках друг друг не мешают⁷, так что спиновый и орбитальный моменты складываются независимо. S пробегает значения 0, 1, а L пробегает значения 0, 1, 2. Получается 6 термов:

$$\underbrace{{}^1S}_1, \underbrace{{}^3S}_3, \underbrace{{}^1P}_3, \underbrace{{}^3P}_{3 \times 3=9}, \underbrace{{}^1D}_5, \underbrace{{}^3D}_{3 \times 5=15}.$$

Суммарная кратность $1 + 3 + 3 + 9 + 5 + 15 = 36$ по-прежнему равна 36, значит выбранных квантовых чисел достаточно для нумерации базисных состояний.

2) Рассмотрим конфигурации np^2 . Два p -электрона на одной оболочке. На оболочке имеется 6 состояний, в каждом из которых не может быть больше 1 электрона. Соответствующая кратность $C_6^2 = 15$. Так что чётности орбитального и спинового моментов должны совпадать⁸ и возможны только 3 терма:

$$\underbrace{{}^1S}_1, \underbrace{{}^3P}_{3 \times 3=9}, \underbrace{{}^1D}_5.$$

Суммарная кратность $1 + 9 + 5 = 15$ по-прежнему равна 15, значит выбранных квантовых чисел достаточно для нумерации базисных состояний.

9.4.5 Правила Хунда 1, 2

Пусть имеется некоторая электронная конфигурация γ , которой соответствуют несколько термов, нумеруемых значениями L и S . Для определения терма с минимальной энергией служат первое и второе *правила Хунда*:

- 1) Минимальной энергией обладает терм с максимальным S ;
- 2) среди таких термов терм с максимальным L .

Условия применимости.

- Эти правила не являются строгими и работают не всегда!
- Лучше всего правила Хунда работают для определения основного состояния атома.
 - В этом случае имеется ряд замкнутых электронных оболочек и одна частично заполненная, которая и даёт вклад в L и S
 - В этом случае они выполняются для первой половины таблицы Менделеева.
- Иногда правила Хунда работают для возбуждённых состояний, но это не надёжно.
- Иногда правила Хунда позволяют не только выделить терм с минимальной энергией, но и упорядочить по энергии другие термы с той же конфигурацией (сначала по убыванию S , потом по убыванию L).

⁷Одноэлектронная волновая функция раскладывается на три множителя, зависящих от r , от углов θ, ϕ и от спиновой переменной m^s . Для двухчастичной волновой функции спиновая часть имеет перестановочную чётность $(-1)^{S+1}$, угловая часть перестановочную чётность $(-1)^L$ (см. главу 4 «Сложение моментов»), а радиальная часть имеет перестановочную чётность $(-1)^{S+L}$ (чтобы общая перестановочная чётность получилась -1 , как полагается для фермионов).

⁸Одноэлектронная волновая функция раскладывается на три множителя, зависящих от r , от углов θ, ϕ и от спиновой переменной m^s . Для двухчастичной волновой функции спиновая часть имеет перестановочную чётность $(-1)^{S+1}$, угловая часть перестановочную чётность $(-1)^L$ (см. главу 4 «Сложение моментов»), а радиальная часть (поскольку для обоих электронов совпадают n и l и радиальная часть одночастичных волновых функций одинакова) имеет перестановочную чётность $+1$. Чтобы общая перестановочная чётность получилась -1 , как полагается для фермионов, S и L должны иметь одинаковую чётность.

Дадим его примерное (нестрогое обоснование).

1) Если координатная часть волновой функции антисимметрична, то волновая функция обращается в нуль при совпадении координат электронов. Поскольку электроны взаимно отталкиваются это понижает их потенциальную энергию. Если координатная волновая функция симметрична, то волновая функция при совпадении координат электронов в нуль не обращается, что повышает их потенциальную энергию. Чтобы минимизировать потенциальную энергию надо, чтобы как можно больше электронов имели одинаковые проекции спина, т. е. чтобы S было максимальным. Можно сказать, что *электроны должны как можно меньше различаться по спину, чтобы как можно больше различаться по координатам*.

2) После максимизации S надо максимизировать L . Этому дадим полуклассическое объяснение. Если электроны вращаются вокруг ядра в разные стороны, то они периодически сближаются, что увеличивает их среднюю потенциальную энергию, поэтому *электронам энергетически выгодно вращаться вокруг ядра в одну сторону, чтобы реже встречаться*⁹, т. е. максимизировать орбитальный момент.

Примеры применения правил Хунда.

1) Рассмотрим конфигурации $n_1p\,n_2p$ ($n_1 \neq n_2$). Эта конфигурация соответствует возбуждённому состоянию атома, так что правила Хунда применяются без гарантий правильности. Как мы уже выяснили, для данной конфигурации имеется 6 термов:

$$^1S, \quad ^3S, \quad ^1P, \quad ^3P, \quad ^1D, \quad ^3D.$$

Максимальный спин равен 1, при спине 1 максимальный орбитальный момента равен 2, что соответствует терму 3D , который имеет наименьшую энергию.

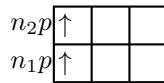


Диаграмма для терма $n_1p\,n_2p(^3D)$

2) Рассмотрим конфигурации pr^2 . Если все нижележащие электронные оболочки заполнены и атом относится к первой половине таблицы Менделеева, то правила Хунда работают. В противном случае они применяются без гарантий правильности. Как мы уже выяснили, для данной конфигурации имеется 3 терма:

$$^1S, \quad ^3P, \quad ^1D.$$

Максимальный спин равен 1. Уже это условие фиксирует как состояние с низшей энергией терм 3P .



Диаграмма для терма $np^2(^3P)$

(?) Диаграммы, которыми мы проиллюстрировали правила Хунда соответствуют некоторым векторам Базиса-1. Однако правила Хунда имеют дело с Базисом-2. Кроме того, при построении диаграмм мы максимизировали не суммарный спин и суммарный орбитальный момент, а их проекции. Насколько построение таких диаграмм при применении правил Хунда корректно и как согласуется с использованием двух разных базисов? На самом деле в Базисе-1 и Базисе-2 есть общие векторы. И это как раз те векторы, для которых проекции суммарного спина и орбитального момента максимальны и минимальны (вспоминаем сложение моментов). Эти состояния обнуляются под действием операторов \hat{S}_+ и \hat{L}_+ (или операторов \hat{S}_- и \hat{L}_-) что гарантирует выполнение равенств $M_S = S$ и $M_L = L$ (или $M_S = -S$ и $M_L = -L$). Из всех $(2S+1)(2L+1)$ векторов Базиса-2, относящихся к искомому терму, в Базис-1 попадает не более 4-х векторов (у которых $M_L = \pm L$ и $M_S = \pm S$), остальные базисные векторы искомого терма выражаются из Базиса-1 с помощью некоторых линейных комбинаций. Но для определения S и L , удовлетворяющих правилам Хунда нам не надо выходить за пределы Базиса-1.

9.4.6 Базис-3 (тонкая структура термов)

Тонкая структура атомных спектров связана с релятивистскими поправками к гамильтониану Паули (7.36), которые мы выводили из уравнения Дирака:

$$\hat{V}_{\text{тонк.стр.}} = \underbrace{\sum_a -\frac{\hat{\mathbf{p}}_a^4}{8m^3c^2}}_{\text{поправка к кин.энергии}} + \underbrace{\sum_a \frac{\varphi'(r_a)\hbar}{2mc r_a} (\hat{\mu}_a, \hat{l}_a)}_{\text{спин-орбитальное взаимодействие}} + \underbrace{\sum_a -e \frac{\hbar^2 \Delta \varphi(r_a)}{8m^2c^2}}_{\text{дарвиновский член}}, \quad \hat{\mu}_a = -2 \underbrace{\frac{e\hbar}{2mc}}_{\mu_B} \hat{\mathbf{s}}_a. \quad (9.7)$$

⁹Разумеется, в стационарном квантовом состоянии плотность вероятности от времени не зависит, но корреляции между положениями электронов имеются и в квантовой механике.

Эти поправки мы добавляем к возмущению \hat{V} в уравнении (9.3).

Поправка к кинетической энергии и дарвиновский член действуют только на координатные степени свободы. Поскольку они сферические-симметричны Базис-2 для них даёт правильные волновые функции нулевого порядка.

Спин-орбитальное взаимодействие создаёт взаимодействие между координатными и спиновыми степенями свободы. Поскольку оно сферически-симметрично полный момент импульса $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ по-прежнему сохраняется, но орбитальный и спиновый моменты по отдельности уже не сохраняются (не коммутируют с гамильтонианом).

Чтобы получить правильные волновые функции нулевого приближения для спин-орбитального взаимодействия нам надо ещё раз сменить базис, воспользовавшись результатами главы 4 «Сложение моментов».

Операторы $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z диагонализуются в новом базисе, который мы назовём *Базисом-3*:

$$|\gamma; L, S; J, M_J\rangle$$

Возмущения (9.3) и (9.7) в Базисе-3 оказываются диагональными.

Возмущение $\hat{V}_{\text{тонк.стр.}}$ частично снимает вырождение уровней $E_{\gamma LS}$, но остаётся вырождение связанное с симметрией суммарного гамильтониана по отношению к одновременному повороту всех (координатных и спиновых) степеней свободы (вырождение по M_J). Выражение оказывается $(2J + 1)$ -кратным.

С точностью до первого порядка теории возмущений

$$E_{\gamma LSJ} = E_{\gamma}^{(0)} + E_{\gamma LS}^{(1)} + E_{\gamma SLJ}^{(1)}.$$

$$E_{\gamma LSJ}^{(1)} = \langle \gamma; L, S; J, M_J | \hat{V}_{\text{тонк.стр.}} | \gamma; L, S; J, M_J \rangle.$$

Таким образом подпространство $\mathcal{H}_{\gamma LSJ}$ собственных векторов гамильтониана $\hat{H}_0 + \hat{V} + \hat{V}_{\text{тонк.стр.}}$ имеет размерность $(2J + 1)$.

(О) Каждому подпространству $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ сопоставляется *спектроскопический терм* с учётом тонкой структуры. Терм обозначается ${}^{2S+1}L_J$, где L — спектроскопический символ, обозначающий суммарный орбитальный момент L , а J — число, обозначающее суммарный момент импульса.

Примеры термов с учётом тонкой структуры.

1) Рассмотрим конфигурации $n_1 p n_2 p$ ($n_1 \neq n_2$). Соответствующая кратность $6 \times 6 = 36$. Ранее мы получили 6 термов:

$$\underbrace{^1S_0}_{1}, \quad \underbrace{^3S_1}_{3}, \quad \underbrace{^1P_1}_{3}, \quad \underbrace{^3P_0}_{1}, \quad \underbrace{^3P_1}_{3}, \quad \underbrace{^3P_2}_{5}, \quad \underbrace{^1D_2}_{5}, \quad \underbrace{^3D_1}_{3 \times 3=9}, \quad \underbrace{^1D_3}_{5}, \quad \underbrace{^3D_2}_{3 \times 5=15}.$$

Теперь часть из этих термов расщепляются:

$$\underbrace{^1S_0}_{1}, \quad \underbrace{^3S_1}_{3}, \quad \underbrace{^1P_1}_{3}, \quad \underbrace{^3P_0}_{1}, \quad \underbrace{^3P_1}_{3}, \quad \underbrace{^3P_2}_{5}, \quad \underbrace{^1D_2}_{5}, \quad \underbrace{^3D_1}_{3}, \quad \underbrace{^3D_2}_{5}, \quad \underbrace{^3D_3}_{7}.$$

3P — кратность 9 3D — кратность 15

2) Рассмотрим конфигурации np^2 . Соответствующая кратность $C_6^2 = 15$. Ранее мы получили 3 терма:

$$\underbrace{^1S_0}_{1}, \quad \underbrace{^3P_0}_{1}, \quad \underbrace{^3P_1}_{3}, \quad \underbrace{^3P_2}_{5}, \quad \underbrace{^1D_2}_{5}.$$

3P — кратность 9

Теперь часть из этих термов расщепляются:

$$\underbrace{^1S_0}_{1}, \quad \underbrace{^3P_0}_{1}, \quad \underbrace{^3P_1}_{3}, \quad \underbrace{^3P_2}_{5}, \quad \underbrace{^1D_2}_{5}.$$

3P — кратность 9

Рассмотрим спин-орбитальное взаимодействие в подпространстве $\mathcal{H}_{\gamma LS}$.

$$\hat{V}_{\text{сп.орб.}} = \sum_a -2 \frac{e\hbar}{2mc} \frac{\varphi'(r_a)\hbar}{2mc r_a} \left(\hat{\mathbf{s}}_a, \hat{\vec{l}}_a \right) \quad (9.8)$$

В подпространстве $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ базисные векторы нумеруются двумя квантовыми числами: M_L и M_S .

Все операторы орбитальных моментов действуют только на орбитальные переменные, т. е. перемешиваются состояния с одинаковыми M_S и разными M_L . Для разных M_L эти операторы действуют одинаково. Для таких операторов пространство $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ разбивается на $2S + 1$ инвариантное подпространство, каждое

из которых имеет размерность $2L+1$. В этих $(2L+1)$ -мерных инвариантных подпространствах нет нетривиальных (отличных от нуль-мерных и $(2L+1)$ -мерных) инвариантных подпространств, что означает, что все \hat{I}_a реализуют в них одно и то же неприводимое представление группы вращений¹⁰, а значит все операторы \hat{I}_a и оператор $\hat{\mathbf{L}}$ пропорциональны друг другу:

$$\hat{I}_a = c_a \hat{\mathbf{L}}, \quad \sum_a c_a = 1.$$

Все спиновые операторы действуют только на спиновые переменные, т. е. перемешивают состояния с одинаковыми M_L и разными M_S . Для разных M_S эти операторы действуют одинаково. Для таких операторов пространство $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ разбивается на $2L+1$ инвариантное подпространство, каждое из которых имеет размерность $2S+1$. В этих $(2S+1)$ -мерных инвариантных подпространствах нет нетривиальных (отличных от нуль-мерных и $(2S+1)$ -мерных) инвариантных подпространств, что означает, что все $\hat{\mathbf{s}}_a$ реализуют в них одно и то же неприводимое представление группы вращений¹¹, а значит все операторы $\hat{\mathbf{s}}_a$ и оператор $\hat{\mathbf{S}}$ пропорциональны друг другу:

$$\hat{\mathbf{s}}_a = c'_a \hat{\mathbf{S}}, \quad \sum_a c'_a = 1.$$

Таким образом, в подпространстве $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ в подпространстве $\mathcal{H}_{\gamma LS}$ спин-орбитальное взаимодействие имеет вид

$$\hat{V}_{\text{сп.орб.}} = \alpha_{\gamma LS} \cdot (\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{L}}) = \alpha_{\gamma LS} \frac{(\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{L}})^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2}{2} = \alpha_{\gamma LS} \frac{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)}{2}. \quad (9.9)$$

Мы видим, что оно, как и должно быть, оказывается диагональным в Базисе-3, причём не зависит от квантового числа M_J .

9.4.7 Правило Ланде (правило Хунда 3)

Пусть имеется некоторый терм γLS , в котором есть только одна частично заполненная электронная оболочка, которой с учётом тонкой структуры расщепляется на несколько термов, нумеруемых значениями J .

$$\delta E_{\text{сп.орб.}} = \alpha_{\gamma LS} \frac{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)}{2}.$$

Мы видим, что для определения терма с минимальной энергией надо определить знак параметра $\alpha_{\gamma LS}$.

Из уравнения (9.8) видно, что для одного электрона на оболочке $\alpha_{\gamma LS} > 0$. Если на оболочке имеется одна дырка, то для неё $\alpha_{\gamma LS} < 0$. Также при переходе от k электронов на оболочке к k дыркам $\alpha_{\gamma LS}$ должно менять знак.

Для определения терма с минимальной энергией служит *правило Ланде (третье правило Хунда)*:

- Если оболочка заполнена менее чем на половину, то $\alpha_{\gamma LS} > 0$ и $J = |L - S|$.
- Если оболочка заполнена более чем на половину, то $\alpha_{\gamma LS} < 0$ и $J = L + S$.
- Если оболочка заполнена ровно на половину, то $\alpha_{\gamma LS} = 0$, $L = 0$ и $J = S = \frac{2l+1}{2}$.

Условия применимости.

- Правило Ланде не являются строгим и работает не всегда!
- Правило Ланде лучше всего работает для определения основного состояния атома.
- Правило Ланде позволяют не только выделить терм с минимальной энергией, но и упорядочить по энергии другие термы с теми же L и S .

Примеры применения правила Ланде (третьего правила Хунда).

- 1) Рассмотрим конфигурации $n_1p\ n_2p. Правило Ланде неприменимо, поскольку имеется две частично заполненных оболочки.$
- 2) Рассмотрим конфигурации np^2 . Соответствующая кратность $C_6^2 = 15$. Ранее мы получили следующие термы:

$$\underbrace{^1S_0}_1, \quad \underbrace{^3P_0}_1, \quad \underbrace{^3P_1}_3, \quad \underbrace{^3P_2}_5, \quad \underbrace{^1D_2}_5.$$

3P — кратность 9

Правила Хунда дали терм 3P . Оболочка заполнена менее чем на половину, так что $J = |1 - 1| = 0$. Наинизшую энергию имеет терм 3P_0 .

¹⁰Здесь мы ссылаемся на результат из теории представлений группы вращений $SO(3)$.

¹¹Здесь мы ссылаемся на результат из теории представлений квантовой группы вращений $SU(2)$.

9.5 АТОМ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Гамильтониан для системы электронов в центральном потенциале во внешнем магнитном поле имеет вид

$$\hat{H} = \sum_a \left(\frac{(\hat{\mathbf{P}}_a + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_a))}{2m} + U(r_a) + 2 \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{s}}_a, \mathbf{B}(\mathbf{r}_a)) \right) + \sum_{a < b} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}.$$

Во многих случаях внешнее магнитное поле на атомных масштабах можно считать однородным и постоянным. Для описания такого поля введём векторный потенциал в виде

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]$$

Теперь гамильтониан можно переписать в виде

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_a \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}_{\hat{H}_0} + \sum_a \left(\frac{e^2}{8mc^2} [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]^2 + \underbrace{\frac{e}{2mc} (\mathbf{P}_a, [\mathbf{B} \times \mathbf{r}])}_{\hbar \hat{\mathbf{l}}_a} + 2 \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{s}}_a, \mathbf{B}) \right).$$

Здесь $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ обозначает все электростатические взаимодействия электронов, как с ядром, так и друг с другом.

Ось z удобно направить вдоль магнитного поля, тогда получаем

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_a \frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2m} + U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\frac{e^2 B^2}{4mc^2} \sum_a \frac{x_a^2 + y_a^2}{2} + \frac{e\hbar}{2mc} B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)}_{\hat{V}}.$$

По сравнению с гамильтонианом \hat{H}_0 в отсутствии магнитного поля добавилось возмущение \hat{V} , которое состоит из осцилляторного потенциала с одинаковой жёсткостью $\frac{e^2 B^2}{4mc^2}$ по осям x и y для всех электронов и взаимодействием магнитного момента атома с магнитным полем. В магнитный момент атома $-\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})$ спиновый момент, по сравнению с орбитальным, входит с двойным весом.

Оценим квадратичное по полю B возмущение:

$$\frac{e^2 B^2}{4mc^2} \sum_a \frac{x_a^2 + y_a^2}{2} \sim \frac{e^2 B^2}{mc^2} a_{\text{ат}}^2 \sim \frac{\varepsilon_{\text{ат}} B^2 a_{\text{ат}}^3}{mc^2} \sim \frac{\varepsilon_{\text{ат}} \mathcal{E}_B}{mc^2}.$$

Здесь $\varepsilon_{\text{ат}}$ — характерная атомная энергия, \mathcal{E}_B — энергия магнитного поля в объёме атома.

Оценим линейное по магнитному полю возмущение:

$$\frac{e\hbar}{2mc} B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z) \sim eB \lambda_{\text{Комп}} \sim eB \underbrace{\frac{e^2}{\hbar c} a_{\text{Б}}}_{\approx \frac{1}{137}} \sim \frac{1}{137} \frac{eB a_{\text{Б}}^{3/2}}{\sqrt{a_{\text{Б}}}} \sim \frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{ат}} \mathcal{E}_B}}{137}.$$

Отношение линейного по B члена к квадратичному

$$\sim \frac{1}{137} \frac{mc^2}{\sqrt{\varepsilon_{\text{ат}} \mathcal{E}_B}}$$

обычно велико, а значит квадратичным членом можно пренебречь.

Если спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь, то можно использовать в качестве правильных волновых функций нулевого порядка теории возмущений Базис-2, тогда добавка к энергии атома в магнитном поле имеет вид

$$\langle \hat{V} \rangle = \frac{e\hbar}{2mc} (M_L + 2M_S).$$

(О) Такое расщепление уровней (и соответствующее ему расщепление спектральных линий) называют *нормальным (простым) эффектом Зеемана*.

Если спин-орбитальным взаимодействием пренебречь нельзя, то теорию возмущений приходится строить в Базисе-3, в котором M_L и M_S не определены. В Базисе-3 до наложения возмущения мы имеем $(2J+1)$ -мерное подпространство состояний $\mathcal{H}_{\gamma LSJ}$. Если ограничить на это подпространство операторы $\hat{\mathbf{L}}$ и $\hat{\mathbf{S}}$, то они окажутся пропорциональны оператору $\hat{\mathbf{J}}$. Это следует из того, что в $\mathcal{H}_{\gamma LSJ}$ нет нетривиальных инвариантных подпространств по отношению к поворотам, порождаемых операторами $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{S}}$ и $\hat{\mathbf{J}}$.

Обозначим ограничение оператора на подпространство $\mathcal{H}_{\gamma LSJ}$ тильдой. Тогда можно написать

$$\tilde{\mathbf{S}} = C\tilde{\mathbf{J}}.$$

$$\widetilde{(\tilde{\mathbf{S}}, \tilde{\mathbf{J}})} = (\tilde{\mathbf{S}}, \tilde{\mathbf{J}}) = CJ(J+1)$$

С другой стороны,

$$(\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{J}}) = \frac{\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 - (\hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}})^2}{2} = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2}$$

Отсюда

$$C = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

$$\tilde{\mathbf{L}} + 2\tilde{\mathbf{S}} = \underbrace{\left(1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}\right)}_{g_J} \tilde{\mathbf{J}}.$$

(О) Здесь g_J — множитель Ланде или гиromагнитный множитель.

Множитель Ланде может меняться от 1 (при $S = 0$) до 2 (при $L = 0$). При $J = 0$ множитель Ланде не определён, но в этом случае пространство $\mathcal{H}_{\gamma LSJ}$ одномерно, и единственное принадлежащее ему состояние Базиса-3 сферически-симметрично, в следствие чего на нём $\langle \hat{S}_z \rangle = \langle \hat{L}_z \rangle = 0$.

Добавка к энергии атома в магнитном поле имеет вид

$$\langle \hat{V} \rangle = g_J \frac{e\hbar}{2mc} M_J.$$

(О) Такое расщепление уровней (и соответствующее ему расщепление спектральных линий) иногда называют *аномальным эффектом Зеемана*.

Глава 10

Теория рассеяния

10.1 Постановка задачи рассеяния

Задача упругого рассеяния описывает инфинитное движение частиц с определённой энергией в некотором поле, не действующем на бесконечности

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi, \quad V(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = 0, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (10.1)$$

Предполагается, что на рассеиватель (расположенный в окрестности точки $\mathbf{r} = 0$) в некотором направлении падает однородный монохроматический¹ поток частиц.

На больших расстояниях от рассеивающего центра потенциал обращается в нуль и частица ведёт себя как свободная. В области с характерным размером ℓ на больших расстояниях ($\frac{1}{k} \ll \ell \ll r$) мы имеем суперпозицию двух волн близких к плоским монохроматическим: падающей волны и рассеянной волны. Направление распространения падающей волны везде одинаково. Направление распространения рассеянной волны направлено от рассеивающего центра, т. е. это сферическая волна², а значит её амплитуда должна спадать как $\frac{1}{r}$.

Таким образом, для задачи рассеяния асимптотика волновой функции на больших расстояниях от рассеивателя имеет вид

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = \underbrace{e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}}_{\psi_{\text{пад.}}} + \underbrace{\frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr}}_{\psi_{\text{расс.}}}, \quad |\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}| = k, \quad \mathbf{k} = k \underbrace{(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)^T}_{\mathbf{n}}. \quad (10.2)$$

Здесь $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$ — падающая волна, $\frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr}$ — рассеянная волна, $f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = f(\phi, \theta)$ — амплитуда рассеяния.

Плотность потока падающих частиц³

$$\mathbf{j}_{\text{пад.}} = |\psi_{\text{пад.}}|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{\partial} \arg(\psi_{\text{пад.}}) = \frac{\hbar \mathbf{k}_0}{m}, \quad |\mathbf{j}_{\text{пад.}}| = \frac{\hbar k}{m}.$$

Чтобы детектировать этот поток надо загородить датчик от рассеянных частиц.

Плотность потока рассеянных частиц на больших расстояниях

$$\mathbf{j}_{\text{расс.}} = |\psi_{\text{расс.}}|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{\partial} \arg(\psi_{\text{расс.}}) = \frac{1}{r^2} |f(\phi, \theta)|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = \frac{1}{r^2} |f(\phi, \theta)|^2 \frac{\hbar k}{m} \mathbf{n}.$$

Чтобы детектировать этот поток надо загородить датчик от частиц налетающего потока, например, диафрагмировать этот поток. Для рассеяния на малые углы разделить налетающие частицы и рассеянные становится всё сложнее и сложнее, а для рассеяния на нулевой угол разделить их становится невозможно.

(!) Именно для рассеяния на малые углы $\sim \frac{1}{ka}$ (a — размер рассеивателя) может наблюдаться расхождение между классическим и квантовым рассеянием в «классическом пределе» $ka \rightarrow \infty$.

Поток частиц в телесный угол $d\Omega$

$$dI_{\text{расс.}} = (\mathbf{j}_{\text{расс.}}, r^2 d\Omega \mathbf{n}) = |f(\phi, \theta)|^2 \frac{\hbar k}{m}.$$

¹То есть все частицы имеют определённую одинаковую энергию.

²Сферическая волна близка к плоской в области размером ℓ малой по сравнению с расстоянием до центра ($\frac{1}{k} \ll \ell \ll r$).

³Привычную формулу для плотности потока вероятности удобно переписать через модуль и аргумент волновой функции:

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \vec{\partial} \psi - \psi \vec{\partial} \psi^*) = |\psi|^2 \frac{\hbar}{m} \vec{\partial} \arg(\psi), \quad \psi = |\psi| e^{i \arg(\psi)}.$$

По определению⁴ дифференциальное сечение рассеяния:

$$d\sigma = \frac{dI_{\text{расс.}}}{|\mathbf{j}_{\text{пад.}}|}.$$

Дифференциальное сечение рассеяния:

$$d\sigma = |f|^2 d\Omega = |f|^2 d\phi d\cos\theta. \quad (10.3)$$

Полное сечение рассеяния:

$$\sigma = \int d\sigma = \int |f|^2 d\phi d\cos\theta. \quad (10.4)$$

(!***) На самом деле асимптотика волновой функции (10.2) в задаче рассеяния важнее, чем уравнение Шрёдингера (10.1). Для эксперимента доступно поведение частиц на больших расстояниях от рассеивателя, и это поведение позволяет определить дифференциальное сечение рассеяния. Как устроен рассеиватель и описывается ли действие рассеивателя уравнением Шрёдингера мы можем не знать. На больших расстояниях от рассеивателя работает уравнение Шрёдингера для свободной частицы и для постановки задачи рассеяния этого достаточно. Например, рассеяние на потенциале предполагает сохранение числа частиц, тогда как сечение рассеяния вполне может описывать ситуацию, когда часть налетающих частиц поглощается рассеивателем. В этом случае кроме сечений рассеяния (дифференциального и полного) можно определить ещё и полное сечение поглощения⁵:

$$\sigma_{\text{погл.}} = \frac{I_{\text{погл.}}}{|\mathbf{j}_{\text{пад.}}|}, \quad (10.5)$$

где $I_{\text{погл.}}$ — число поглощённых частиц в единицу времени.

10.2 Оптическая теорема

Сама постановка задачи рассеяния предполагает, что единственный источник частиц — падающая волна. Все рассеянные частицы до рассеяния соответствовали падающей волне, а значит после прохождения рассеивателя падающая волна должна быть ослаблена в той мере, в которой в ней уменьшилось число частиц. Падающая волна может быть ослаблена только за счёт интерференции с волной рассеянной упруго строго вперёд. Если падающая волна распространялась вдоль оси z

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = e^{ikz} + \frac{f(\phi, \theta)}{r} e^{ikr},$$

то рассеяние строго вперёд соответствует $\theta = 0$.

Падающая волна имеет постоянную амплитуду, а рассеянная — амплитуду $\sim \frac{1}{r}$, которая исчезает на бесконечности. Это связано с тем, что мы рассматривали всего один рассеиватель на бесконечный (если проинтегрировать в плоскости перпендикулярной направлению потока) поток налетающих частиц.

Чтобы увидеть изменение числа частиц в налетающем потоке надо либо диафрагмировать налетающий поток, либо рассмотреть бесконечное число рассеивателей, расположенных равномерно в плоскости перпендикулярной направлению потока. Проще рассмотреть второй вариант.

Пусть в плоскости $z = 0$ равномерно с поверхностью плотностью n расположены одинаковые рассеиватели. Рассеиватели расположены достаточно редко, чтобы не мешать друг другу.

Для всей совокупности рассеивателей рассеянную волну надо просуммировать по всем рассеивателям (проинтегрировать по поверхности $z = 0$)

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = e^{ikz} + \int \frac{f(\phi, \theta)}{r} e^{ikr} n \, ds, \quad ds = dx_0 \, dy_0. \quad (x - x_0, y - y_0, z) = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta).$$

Здесь $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ задаёт точку в пространстве, в которой задана волновая функция, а x_0, y_0 — точку на плоскости $z = 0$, в которой расположен рассеиватель.

⁴Обратите внимание, что сечение рассеяния имеет размерность сечения (площади). В классической физике, если рассеиватель работает детерминистически и направление рассеяния определяется тем, к какую точку рассеивателя попала частица, дифференциальное сечение рассеяния — площадь поперечного сечения той части налетающего потока частиц, которая рассеивается в данный телесный угол $d\Omega$.

Подробнее понятие сечения процесса разобрано в книге МТП, глава 3.14 «Рассеяние».

⁵Чтобы ввести дифференциальное сечение поглощения акты поглощения надо было бы как-то дифференцировать (различать).

Перейдём от интегрирования по x_0, y_0 к интегрированию по углам:

$$ds = dx_0 dy_0 = \frac{r^2 d\Omega}{\cos \theta} = r^2 d\phi \frac{d\cos \theta}{\cos \theta}, \quad r = \frac{z}{\cos \theta}, \quad c = \cos \theta.$$

По углу ϕ интегрируем от 0 до 2π , а по углу θ от 0 до $\frac{\pi}{2}$. По $c = \cos \theta$ интегрирование получаем от 0 до 1. Усредним амплитуду рассеяния по углу ϕ :

$$F(c) = F(\cos \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(\phi, \theta) d\phi.$$

$$\begin{aligned} \psi(z \rightarrow +\infty) &= e^{ikz} \left(1 + n \int \frac{f(\phi, \theta)}{r} e^{ik(r-z)} r^2 d\phi \frac{dc}{c} \right) = e^{ikz} \left(1 + 2\pi n \int_0^1 F(c) e^{ik(r-z)} r \frac{dc}{c} \right) = \\ &= e^{ikz} \left(1 + 2\pi n z \int_0^1 F(c) e^{ikz(1/c-1)} \frac{dc}{c^2} \right). \end{aligned}$$

Введём новую переменную интегрирования $g = \frac{1}{c}$, $dg = -\frac{dc}{c^2}$, после чего проинтегрируем по частям:

$$\begin{aligned} \psi(z \rightarrow +\infty) &= e^{ikz} \left(1 + 2\pi n z \int_1^{+\infty} F\left(\frac{1}{g}\right) e^{ikz(g-1)} dg \right) = e^{ikz} \left(1 + \frac{2\pi n}{ik} \int_1^{\infty} F\left(\frac{1}{g}\right) \frac{\partial e^{ikz(g-1)}}{\partial g} dg \right) = \\ &= e^{ikz} \left(1 + \frac{2\pi n}{ik} F\left(\frac{1}{g}\right) e^{ikz(g-1)} \Big|_1^{\infty} + \frac{2\pi n}{ik} \int_1^{\infty} F'\left(\frac{1}{g}\right) \frac{1}{g^2} e^{ikz(g-1)} dg \right). \\ &\lim_{z \rightarrow 0} \int_1^{\infty} F'\left(\frac{1}{g}\right) \frac{1}{g^2} e^{ikz(g-1)} dg = 0 \\ \psi(z \rightarrow +\infty) &= e^{ikz} \left(1 + \frac{2\pi n}{ik} F(0) e^{ikz\infty} - \frac{2\pi n}{ik} F(1) \right). \end{aligned}$$

Как обычно, при взятии интегралов Фурье можно считать $e^{i\infty} = 0$, поэтому получаем, что на больших расстояниях после плоскости, в которой расположены рассеиватели доминирует волна, которая отличается от падающей волны e^{ikz} на комплексный множитель (амплитуду), который выражается через $F(1)$ — амплитуду рассеяния строго вперёд:

$$\psi(z \rightarrow +\infty) = e^{ikz} \left(1 + i \frac{2\pi n}{k} F(1) \right).$$

Плотность потока частиц в такой волне отличается от плотности потока в падающей волне на следующий множитель

$$\begin{aligned} \frac{|\mathbf{j}_{\text{прош.}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад.}}|} &= \left| 1 + i \frac{2\pi n}{k} F(1) \right|^2 = \left(1 + i \frac{2\pi n}{k} F(1) \right) \left(1 - i \frac{2\pi n}{k} F^*(1) \right) = \\ &= 1 + \frac{2\pi}{k} \underbrace{(iF(1) - iF^*(1))}_{-2 \operatorname{Im} F(1)} n + \frac{4\pi^2}{k^2} |F(1)|^2 n^2. \end{aligned}$$

Взаимное влияние рассеивающих центров должно быть мало, поэтому нас интересует предел $n \rightarrow 0$, в этом переделе

$$\frac{|\mathbf{j}_{\text{прош.}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад.}}|} = 1 - \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} F(1) n + o(n). \quad (10.6)$$

С другой стороны, если пренебречь взаимным влиянием рассеивателей,

$$\frac{|\mathbf{j}_{\text{прош.}}|}{|\mathbf{j}_{\text{пад.}}|} = 1 - \sigma_{\text{полн.}} n, \quad (10.7)$$

где $\sigma_{\text{полн.}}$ — полное сечение всех процессов, которые убирают частицы из налетающего потока, т. е. сумма полного сечения рассеяния с полным сечением поглощения и полным сечением всех реакций, в которые могут вступить налетающие частицы⁶.

Сравнив формулы (10.6) и (10.7) между собой, получаем *оптическую теорему*, которая связывает мнимую часть амплитуды упругого рассеяния строго вперёд с полным сечением всех процессов:

$$\sigma_{\text{полн.}} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(\theta = 0). \quad (10.8)$$

10.3 Интегральное уравнение рассеяния

Перепишем уравнение Шрёдингера для задачи рассеяния (10.1) с помощью функции Грина и построим соответствующую теорию возмущений, как в параграфе 1.6 «Оператор Грина в непрерывном спектре».

Запишем уравнение Шрёдингера (10.1) перенеся в правую часть уравнения вклад потенциала:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E \right) \psi(\mathbf{r}) = -V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (10.9)$$

Выразить решение уравнения (10.9) через решение неоднородного уравнения

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E \right) \psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) = \int \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}. \quad (10.10)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - E \right) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (10.11)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \quad (10.12)$$

Удобно выбрать такое представление (10.12) функции $\psi(\mathbf{r})$, чтобы первое слагаемое соответствовало падающей волне $\psi_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}$ (падающая волна как раз решает однородное уравнение), а второе — рассеянной.

Функция Грина является решением неоднородного уравнения (10.11), такое решение определено с точностью до добавки, решающей соответствующее однородное (с равной нулю правой частью) уравнение. Разным функциям Грина при фиксированной функции $\psi_0(\mathbf{r})$ будут соответствовать разные волновые функции (10.12), решающие уравнение (10.9).

Пусть

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= G(R), \quad R = |\mathbf{R}|, \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{R}} - E \right) G(\mathbf{R}) &= \delta^3(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (10.13)$$

Удобно представить функцию Грина в виде интеграла Фурье:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{R}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^3 \mathbf{q}, \quad \tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} G(\mathbf{R}) d^3 \mathbf{R}. \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{R}} - E \right) G(\mathbf{R}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \frac{(q^2 - k^2)\hbar^2}{2m} \tilde{G}(\mathbf{q}) d^3 \mathbf{q} = \delta^3(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d^3 \mathbf{q}. \\ \tilde{G}(\mathbf{q}) &= \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2} \frac{1}{q^2 - k^2}. \\ G(\mathbf{R}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \frac{2m}{(2\pi)^{3/2}\hbar^2} \frac{1}{q^2 - k^2} d^3 \mathbf{q} = \frac{2m}{(2\pi)^3 \hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{R} \cos \vartheta}}{q^2 - k^2} \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi d \cos \vartheta dq}_{d^3 \mathbf{q}}. \end{aligned}$$

Здесь углы φ и ϑ — это сферические углы, если ось z направить вдоль вектора \mathbf{R} .

От угла φ подынтегральное выражение не зависит, а интегрирование идёт от 0 до 2π , что даёт множитель

$$\int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi.$$

⁶Не должно быть только реакций, которые добавляют лишние частицы в налетающий поток.

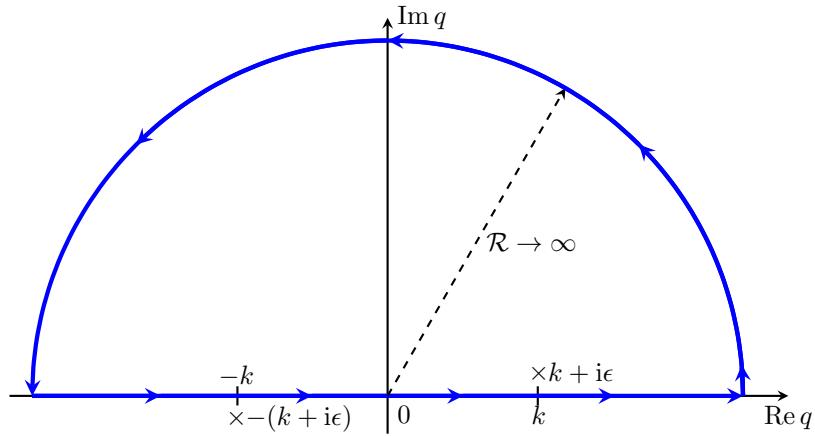


Рис. 10.1: Контур интегрирования в формуле (10.14). Чтобы сместить правый полюс внутрь контура, а левый — наружу можно добавить к k малую мнимую добавку $i\epsilon$ ($\epsilon > 0$), которую потом устремить к нулю. Смешённые положения полюсов обозначены крестиками (\times)

По $C = \cos \vartheta$ интегрирование идёт от -1 до $+1$, что даёт множитель

$$\int_{-1}^{+1} e^{iqRC} dC = \frac{e^{iqRC}}{iqR} \Big|_{-1}^{+1} = \frac{e^{iqR} - e^{-iqR}}{iqR}.$$

Остаётся проинтегрировать по q от 0 до $+\infty$:

$$G(\mathbf{R}) = \frac{2m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{iR} \int_0^{+\infty} \frac{e^{iqR} - e^{-iqR}}{q^2 - k^2} q dq = \frac{2m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{iR} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iqR}}{q^2 - k^2} q dq. \quad (10.14)$$

Часть подынтегрального выражения, содержащую e^{-iqR} мы проинтегрировали сделав замену $q \rightarrow -q$, это дополнено интеграл от другого слагаемого до интеграла по всей вещественной прямой.

Интеграл (10.14) имеет полюсы в точках $q = \pm k$. Мы будем брать этот интеграл с помощью вычетов. Подынтегральное выражение пропорционально e^{iqR} в верхней полуплоскости комплексной плоскости эта экспонента затухает, а в нижней — нарастает, поэтому чтобы дополнить вещественную прямую до замкнутого контура интегрирования, замыкать её следует через верхнюю полуплоскость (см. рис. 10.1).

Вклады вычетов в точках $q = \pm k$ пропорциональны $\frac{e^{\pm ikR}}{R}$, т. е. вполне расходящейся от начала координат и вполне сходящейся к началу координат. Мы хотим выразить через функцию Грина рассеянную волну, поэтому вычеты надо обходить так, чтобы внутрь контура попал только вычет в точке $q = +k$ (см. рис. 10.1, аналогично рис. 1.2).

$$G(\mathbf{R}) = \frac{2m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{iR} \underbrace{2\pi i \frac{e^{ikR}}{2k} k}_{\text{вычет}} = \frac{m}{2\pi \hbar^2} \frac{e^{ikR}}{R}. \quad (10.15)$$

Подставив в уравнение (10.12) $\psi_0 = e^{ik_0 r}$ и функцию Грина (10.15) получаем интегральное уравнение задачи рассеяния на волновую функцию с асимптотикой (10.2)

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_0 r} - \frac{m}{2\pi \hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}'. \quad (10.16)$$

Будем считать, что характерный радиус действия потенциала a , тогда интеграл берётся по области $r' < a$, а на больших расстояниях у нас имеется малый параметр a/r .

При $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ с точностью до линейного члена по малому параметру получаем

$$R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - (\mathbf{n}, \mathbf{r}') + o(a/r), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad \mathbf{k} = k\mathbf{n}.$$

Асимптотика волновой функции (10.16) имеет вид, соответствующий (10.2)

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = e^{ik_0 r} + \underbrace{\frac{e^{ikr}}{r} \left(-\frac{m}{2\pi \hbar^2} \int e^{-ik\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \right)}_{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = f(\phi, \theta)}. \quad (10.17)$$

(л) Для того, чтобы сместить полюсы с контура интегрирования правильным образом (см. рис. 10.1) мы добавили к волновому числу k мнимую добавку $i\epsilon$ ($\epsilon > 0$), которую потом устремили к нулю. Обычно в таких случаях вместо $k + i\epsilon$ пишут $k + i0$. Если для такого волнового числа вычислить квадрат, то он тоже получает мнимую положительную добавку

$$(k + i\epsilon)^2 = k^2 + i2\epsilon k + o(\epsilon).$$

Обычно эту формулу пишут в виде

$$(k + i0)^2 = k^2 + i0.$$

Формула (10.14) записывается как

$$G(\mathbf{R}) = \frac{2m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{iR} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iqR}}{q^2 - k^2 - i0} q dq = \frac{2m}{(2\pi)^2 \hbar^2} \frac{1}{iR} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iqR}}{(q - k - i0)(q + k + i0)} q dq. \quad (10.18)$$

Такая запись уже автоматически указывает правильный порядок обхода полюсов, приводящий к формуле (10.15).

10.4 Борновское приближение

Из интегрального уравнения (10.16) можно методом последовательных приближений, взяв в качестве нулевого приближения $e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}$ строить теорию возмущений. Получающиеся при этом приближённые решения задачи рассеяния называются *борновскими приближениями*. Если упоминается борновское приближение без указания порядка приближения, то подразумевается первый порядок. Им мы и ограничимся⁷.

(Первое) борновское приближение получается, если в $f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = f(\phi, \theta)$ из формулы (10.17) вместо $\psi(\mathbf{r}')$ подставить $\psi_0(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}'}$:

$$f_B(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = f_B(\phi, \theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (10.19)$$

Разность волновых векторов в показателе экспоненты соответствует переданному от потенциала частице импульсу:

$$\mathbf{p}_{\text{перед.}} = \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0).$$

(ф) В борновском приближении амплитуда рассеяния с точностью до постоянного коэффициента — это преобразование Фурье потенциала, где волновому вектору соответствует переданный импульс. Так что амплитуда рассеяния как функция переданного импульса содержит всю информацию для вычисления рассеивающего потенциала. Дифференциальное сечение рассеяния пропорционально абсолютной величине амплитуды рассеяния, так что измерив на эксперименте дифференциальное сечение рассеяния как функцию переданного импульса мы получаем преобразование Фурье потенциала, взятое по модулю. Информация о фазе амплитуды рассеяния при этом теряется, но всё равно мы получаем существенную информацию о рассеивающем потенциале (особенно если у нас есть теоретическая модель, которую мы хотим проверить на эксперименте).

Критерий применимости борновского приближения — малость отклонения волновой функции (10.16) от $e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}$, т. е.

$$F = \left| -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' \right| \ll 1. \quad (10.20)$$

Оценим выполнение критерия применимости для двух частных случаев. Обозначим a — характерный радиус потенциала, V — характерная величина потенциала.

- **Медленные частицы:** $ka \lesssim 1$. Оценим критерий применимости из соображений размерности.

$$F \sim \frac{m}{\hbar^2} \frac{1}{a} V 1 a^3 \sim V \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2} \right)^{-1} \ll 1. \quad (10.21)$$

Величина $\frac{a}{\hbar}$ — минимальная неопределенность импульса, которую может иметь частица локализованная в области размером a , соответственно $\varepsilon_{\min} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ — минимальная энергия, которую может иметь частица, локализованная в области размером a . Так что (10.21) можно переписать как

$$V \ll \varepsilon_{\min}.$$

⁷Полученная выше оптическая теорема выполняется для точного решения задачи рассеяния, а значит для приближения конечного порядка она может нарушаться.

- **Быстрые частицы:** $ka \gg 1$. Оценим критерий применимости из квазиклассики. Квазиклассическая волновая функция может быть выражена через классический импульс:

$$p(\mathbf{r}) = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{r}))} = \sqrt{2m \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V(\mathbf{r}) \right)} = \hbar k \sqrt{1 - \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2 k^2}} \sim \hbar k \left(1 - \frac{mV}{\hbar^2 k^2} \right)$$

Набег фазы на рассеивателе

$$\delta\alpha \sim \frac{pa}{\hbar} \sim ka \left(1 - \frac{mV}{\hbar^2 k^2} \right).$$

Вклад потенциала в набег фазы должен быть малым:

$$\delta_V \alpha \sim ka \frac{2mV}{\hbar^2 k^2} = \frac{1}{ka} V \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2} \right)^{-1} \ll 1. \quad (10.22)$$

$$V \ll ka \varepsilon_{\min}.$$

Часто приходится рассматривать рассеяния на сферически-симметричных потенциалах $V(\mathbf{r}) = V(r)$, выпишем соответствующую амплитуду рассеяния в борновском приближении (10.19). Удобно направить ось z вдоль \mathbf{k}_0 , т. е. налетающего потока частиц. Тогда амплитуда рассеяния не зависит от угла ϕ :

$$f_B(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}'} V(r') r'^2 d\varphi d\cos\vartheta dr',$$

где переменные интегрирования φ и ϑ удобно ввести, как сферические углы, для которых в роли оси z выступает направление вектора \mathbf{q} ,

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0 — переданный импульс (делённый на \hbar),$$

$$q = |\mathbf{q}| = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Обозначаем $C = \cos\vartheta$, интегрируем по C от -1 до $+1$ и получаем

$$f_B(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-iqr' C} V(r') r'^2 2\pi dC dr' = -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{e^{-iqr'} - e^{iqr'}}{-iqr'} r'^2 dr' = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin(qr') r' dr'.$$

Окончательно для сферически симметричного потенциала

$$f_B(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty \sin(qr') r' dr' = -\frac{m}{\hbar^2 k \sin \frac{\theta}{2}} \int_0^\infty \sin(2kr' \sin \frac{\theta}{2}) r' dr'. \quad (10.23)$$

10.5 Фазовая теория рассеяния

Фазовая теория рассеяния применима к рассеянию на сферически-симметричных рассеивателях. При движении в центральном (сферически-симметричном) поле мы можем воспользоваться сохранением орбитального момента импульса и свести задачу к одномерным задачам о радиальном движении с разными значениями l . Мы уже делали это для финитного движения (дискретного спектра, связанных состояний), в задаче рассеяния тот же метод применяется для инфинитного движения (непрерывного спектра).

В качестве рассеивателя рассмотрим сферически-симметричный потенциал $V(r)$, такой что $V(\infty) = 0$. Состояния с определённой энергией можно искать в виде произведения радиальной части на угловую:

$$\psi_E(\mathbf{r}) = R_l(r) Y_{lm_l}(\theta, \phi). \quad (10.24)$$

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 Y_{lm_l} &= l(l+1) Y_{lm_l}, \quad \hat{l}_z Y_{lm_l} = m Y_{lm_l}. \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} R_l + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) R_l &= E R_l. \end{aligned} \quad (10.25)$$

Такие состояния не имеют правильной асимптотики для задачи рассеяния (10.2), но волновая функция в задаче рассеяния соответствует определённому значению энергии, а значит она попадает в подпространство, натянутое на волновые функции вида (10.24) и может быть по таким функциям разложено.

(Ф) Уравнение (10.25) можно переписать через функцию $\chi_l(r) = r R_l(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \chi_l}{\partial r^2} + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right) \chi_l = E \chi_l, \quad \chi_l(0) = 0. \quad (10.26)$$

Уравнение (10.26) соответствует одномерному движению частицы в потенциале

$$V_{\text{эфф.}}(r) = \begin{cases} \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r), & r > 0, \\ +\infty, & r \leq 0. \end{cases} \quad (10.27)$$

Асимптотика решения уравнения (10.26) на бесконечности соответствует асимптотике одномерной задачи рассеяния. Таким образом трёхмерная задача рассеяния в сферически-симметричном потенциале сводится к совокупности одномерных задач рассеяния в потенциалах (10.27). Причём коэффициенты отражения в таких потенциалах заведомо равны 1, поскольку частица не может уйти на отрицательную полупрямую. При этом амплитуды рассеяния равны 1 по модулю. Так что асимптотика решения уравнения (10.26) определяется фазой (аргументом) амплитуд отражения в потенциалах (10.27). Ниже мы параметризуем эти фазы параметрами δ_l .

Если налетающий поток частиц направлен вдоль оси z , то волновая функция оказывается аксиально-симметричной и фаза рассеяния не зависит от угла ϕ :

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}, \quad (10.28)$$

Поскольку $Y_{lm_l} = C_{lm_l} P_l^{m_l}(\cos \theta) e^{im_l \phi}$, в разложении участвуют только функции для которых $m_l = 0$.

Далее нам будет удобнее вместо $Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta)$ использовать полиномы Лежандра $P_l(\cos \theta)$.

$$\int_{-1}^{+1} P_{l_1}(c) P_{l_2}(c) dc = \frac{2}{2l_1 + 1} \delta_{l_1 l_2}, \quad c = \cos \theta.$$

Нам также понадобится следующее свойство полиномов Лежандра:

$$P_l(+1) = +1, \quad P_l(-1) = (-1)^l. \quad (10.29)$$

Разложение волновой функции в задаче рассеяния по функциям вида (10.24) запишется в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} R_l(r) P_l(c).$$

Также нам понадобится разложение по функциям вида (10.24) налетающей волны:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{+\infty} G_l(\rho) P_l(c), \quad \rho = kr.$$

При этом нас интересуют не сами функции R_l и G_l , а их асимптотики при $\rho \rightarrow \infty$.

$$G_l(\rho) \frac{2}{2l+1} = \int_{-1}^{+1} \underbrace{e^{i\rho c}}_{\frac{d}{dc} \frac{e^{i\rho c}}{i\rho}} P_l(c) dc = \underbrace{\frac{e^{i\rho c}}{i\rho} P_l(c) \Big|_{-1}^{+1}}_{\text{главный член при } \rho \rightarrow \infty} - \int_{-1}^{+1} \underbrace{\frac{e^{i\rho c}}{i\rho} P_l'(c) dc}_{\frac{d}{dc} \frac{e^{i\rho c}}{(i\rho)^2}}$$

Мы видим, что последовательным интегрированием по частям мы получаем члены пропорциональные $\frac{1}{\rho^k}$, $k = 1, \dots, l+1$ (после $l+1$ дифференцирования полином степени l обратится в нуль). Но нас интересует главный член при больших ρ .

$$G_l(\rho \rightarrow \infty) = \frac{2l+1}{2i\rho} (e^{i\rho} - (-1)^l e^{-i\rho}).$$

В получившемся выражении мы видим сходящуюся к началу координат волну $e^{-i\rho}$ и волну расходящуюся от начала координат $e^{i\rho}$ с той же по модулю амплитудой. Так и должно быть, чтобы входящий и исходящий потоки компенсировали друг друга и плотность вероятности в стационарном состоянии не зависела от времени. Множитель $\frac{1}{\rho}$ связан со тем, что мы работаем в сферических координатах.

При разложении функции с асимптотикой (10.28) вклад в сходящуюся волну даёт только налетающий поток частиц, а рассеянная волна даёт вклад только в расходящуюся волну. При этом входящий и исходящий потоки снова должны компенсировать друг друга, а значит соответствующие амплитуды

должны совпадать по модулю. Это позволяет нам написать асимптотику $R_l(\rho \rightarrow \infty)$ с точностью до одного параметра δ_l , который называется *фазой рассеяния*:

$$R_l(\rho \rightarrow \infty) = \frac{2l+1}{2i\rho} \left(e^{i(\rho+2\delta_l)} - (-1)^l e^{-i\rho} \right) \sim \frac{\sin(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l)}{r}. \quad (10.30)$$

Для определения фазы рассеяния δ_l следует исследовать уравнение (10.25).

Асимптотика рассеянной волны имеет вид

$$\frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} = \sum_{l=0}^{\infty} (R_l(kr) - G_l(kr)) P_l(\cos \theta) = \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \underbrace{\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik}}_{f_l} P_l(\cos \theta) \quad (10.31)$$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta), \quad f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l}}{k} \sin \delta_l.$$

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

$$\sigma = \int d\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l = 4\pi (2l+1) |f_l|^2 = 4\pi (2l+1) \frac{\sin^2 \delta_l}{k^2}.$$

f_l называется *парциальной амплитудой рассеяния*, а σ_l — *парциальным сечением рассеяния*.

Для полученных амплитуд и сечений рассеяния мы можем проверить оптическую теорему (10.8) (см. § 10.2).

$$f(0) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l \underbrace{P_l(1)}_1 = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{e^{i\delta_l}}{k} \sin \delta_l = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{\cos \delta_l + i \sin \delta_l}{k} \sin \delta_l.$$

$$\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{k^2} \sin^2 \delta_l = \sigma.$$

В данном случае имеет место только упругое рассеяние, поэтому $\sigma = \sigma_{\text{полн.}}$.

10.5.1 Рассеяние с поглощением*

Уравнение Шредингера для движения частицы в потенциале (10.1), как и полученное из него в сферически-симметричном случае методом разделения переменных уравнение (10.25) и эквивалентное ему (10.26) могут описывать только процессы с сохраняющимся числом частиц. Однако, асимптотика на бесконечности (10.2) позволяет описывать процессы, при которых число частиц не сохраняется⁸, поскольку данная асимптотика описывает поведение свободной частицы на больших расстояниях от рассеивателя, и не ограничивает процессы при конечных значениях r .

Рассмотрим рассеяние с поглощением в сферически симметричном случае.

Асимптотика (10.30) в этом случае модифицируется с заменой $e^{i2\delta_l}$ на S_l :

$$R_l(\rho \rightarrow \infty) = \frac{2l+1}{2i\rho} (S_l e^{i\rho} - (-1)^l e^{-i\rho}), \quad |S_l| \leq 1. \quad (10.32)$$

Здесь S_l — амплитуда отражения⁹ частицы с данным орбитальным моментом l . Если $|S_l| = 1$, то $S_l = e^{i2\delta_l}$ и мы возвращаемся к асимптотике (10.30) и обычным вещественным фазам рассеяния δ_l .

Если $|S_l| < 1$ (есть поглощение), то такая амплитуда не может быть получена из уравнения вида (10.25). Вместо этого нужны какие-то другие способы описания взаимодействия частицы с рассеивателем.

Вместо уравнения (10.31) мы получаем

$$\frac{f(\theta)}{r} e^{ikr} = \sum_{l=0}^{\infty} (R_l(kr) - G_l(kr)) P_l(\cos \theta) = \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \underbrace{\frac{S_l - 1}{2ik}}_{f_l} P_l(\cos \theta) \quad (10.33)$$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta), \quad f_l = \frac{S_l - 1}{2ik}.$$

⁸Мы уже обсуждали выше процессы с несохранением числа частиц, при определении сечения поглощения (10.5).

⁹По сравнению с постановкой обычной одномерной задачи рассеяния в асимптотике (10.32) у падающей волны присутствует знак $(-1)^{l+1}$. Этот знак нужен исключительно для удобства сопоставления с асимптотикой (10.30).

Для дифференциального и полного сечения рассеяния получаем

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

$$\sigma_{\text{пасс.}} = \int d\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad \sigma_l = 4\pi(2l+1) |f_l|^2 = 4\pi(2l+1) \frac{|S_l - 1|^2}{4k^2} = 4\pi(2l+1) \frac{1 + |S_l|^2 - 2 \operatorname{Re} S_l}{4k^2}. \quad (10.34)$$

Но кроме рассеяния теперь есть ещё и поглощение. Для частицы с орбитальным моментом l вероятность поглощения составляет

$$p_l^{\text{погл.}} = 1 - |S_l|^2.$$

Но как от вероятностей перейти к сечению?

Мы видим, что максимальное возможное значения парциального сечения рассеяния соответствует $S_l = e^{i2\delta_l} = -1$

$$\max_{S_l} \sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2}.$$

Какая часть этого максимального парциального сечения может прийтись на поглощение?

Воспользуемся оптической теоремой (10.8)

$$\begin{aligned} f(0) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{S_l - 1}{2ik}. \\ \sigma_{\text{полн.}} &= \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(0) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{2 - 2 \operatorname{Re} S_l}{4k^2} \\ \sigma_{\text{погл.}} &= \sigma_{\text{полн.}} - \sigma_{\text{пасс.}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1 - |S_l|^2}{4k^2} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{p_l^{\text{погл.}}}{4k^2}. \end{aligned}$$

Мы видим, что на поглощение может прийтись не более четверти максимального парциального сечения. Откуда взялось это соотношение? Посмотрим внимательно на выражение для парциальной амплитуды рассеяния, оно содержит $|S_l - 1|^2$. S_l — амплитуда вероятности (амплитуда отражения при данном l на потенциале $V(r)$), и 1 — тоже амплитуда вероятности (амплитуда отражения при данном l для свободной частицы). Разность этих двух амплитуд соответствует тому, что мы вычитаем из волновой функции падающую волну e^{ikz} . Физически это означает, что мы ставим диафрагму так, что для интересующих нас направлений она отсекает налетающий поток частиц и на детектор попадают только рассеянные частицы. При вычитании двух амплитуд происходит интерференция, которая может увеличивать вероятность вплоть до четырёх раз (при $S_l = -1$ по сравнению с $S_l = 0$). Поэтому максимальное парциальное сечение поглощения оказывается в 4 раза меньше, чем максимальное парциальное сечение рассеяния.

(ф) Поглощения без рассеяния не бывает! Если есть поглощение, то есть и рассеяние (дифракция на поглощающем объекте).

Максимальное парциальное сечение поглощения

$$\frac{\pi}{k^2} (2l+1) = \frac{\pi}{k^2} [(l+1)^2 - l^2].$$

Это площадь кольца (см. рис. 10.2) между двумя концентрическими окружностями радиусами $\frac{l+1}{k}$ и $\frac{l}{k}$. Эти радиусы соответствуют прицельным параметрам¹⁰ отвечающим классическим моментам импульса $\hbar(l+1)$ и $\hbar l$.

10.5.2 Рассеяние и поглощение на большом чёрном шаре*

Рассмотрим рассеяния и поглощение частиц на большом шаре радиуса a ($ka \gg 1$) поглощающем все попадающие в него частицы.

Предел $ka \gg 1$ — это классический предел, так что мы можем воспользоваться полуклассическими соображениями.

Если b — прицельный параметр частицы (расстояние от прямой, по которой она исходно движется до параллельной прямой, проходящей через центр мишени), то момент импульса (размерный и обезразмеренный) частицы равен

$$|\mathbf{L}| = pb = \hbar kb, \quad l = kb.$$

¹⁰Прицельный параметр частицы — расстояние от прямой, по которой она исходно движется до параллельной прямой, проходящей через центр мишени.

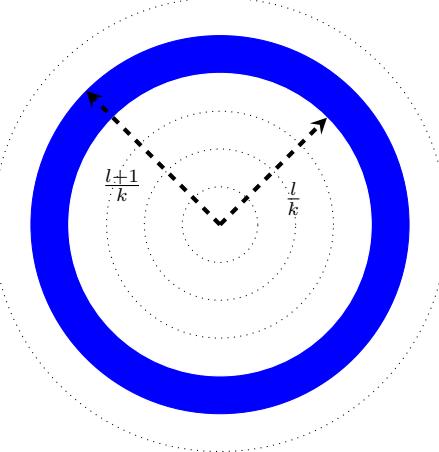


Рис. 10.2: Кольцо, площадь которого соответствует максимальному парциальному сечению поглощения с моментом импульса (размерным) $\hbar l$. Можно считать, что это кольцо расположено на бесконечности в плоскости перпендикулярной налетающему потоку частиц, причём частица, пролетающая через центр кольца имеет направление движения строго к началу координат (нулевой прицельный параметр). Классические частицы пролетающие через кольцо имеют момент импульса от $\hbar l$ до $\hbar(l + 1)$

Частицы у которых $b \leq a$ попадают в шар и им поглощаются, что соответствует тому, что поглощаются все частицы у которых $l \leq ka$.

Частицы у которых $b > a$ пролетают мимо шара, это частицы у которых $l > ka$.

Из таких полуклассических представлений полагаем

$$S_l = \begin{cases} 0, & l \leq ka, \\ 1, & l > ka. \end{cases} \quad (10.35)$$

Сечение поглощения даёт ожидаемый ответ — площадь поперечного сечения шара:

$$\sigma_{\text{погл.}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1 - |S_l|^2}{4k^2} = 4\pi \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \frac{1}{4k^2} = \frac{\pi}{k^2} \frac{(2ka+1+0)(ka+1)}{2} \approx \pi a^2.$$

Но полное сечение рассеяния оказывается таким же:

$$\sigma_{\text{расс.}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{|S_l - 1|^2}{4k^2} = 4\pi \sum_{l=0}^{ka} (2l+1) \frac{1}{4k^2} \approx \pi a^2.$$

Сечение рассеяния не мало, но в классике мы его не замечаем, потому, что это рассеяние на малые углы, рассеяние на которые трудно детектировать. Рассеяние на чёрном шаре — это дифракция. Характерные углы на которые происходит рассеяние — $\sim \frac{1}{ka} \ll 1$.

10.6 Рассеяние тождественных частиц

Пусть две тождественные частицы со спином s каждая рассеиваются друг на друге. Задача двух тел массами $m_1 = m_2 = m$ в системе отсчёта центра масс сводится к задаче движения одного тела массы $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2}$. При этом замена $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \rightarrow -\mathbf{r}$ соответствует перестановке пространственных координат частиц.

Оператор перестановки частиц действует так:

$$\hat{P}_{12} \Psi(\mathbf{r}_1, m_1^s; \mathbf{r}_2, m_2^s) = \Psi(\mathbf{r}_2, m_2^s; \mathbf{r}_1, m_1^s) = (-1)^{2s} \Psi(\mathbf{r}_1, m_1^s; \mathbf{r}_2, m_2^s).$$

Мы записали общую формулу для бозонов ($(-1)^{2s} = +1$) и фермионов ($(-1)^{2s} = -1$).

Асимптотика волновой функции для рассеяния частицы на потенциале (10.2) не соответствует перестановочной симметрии тождественных частиц и не может выполняться. Кроме того, для частиц с ненулевым спином следует учесть спиновые переменные.

Мы рассмотрим простейший случай, когда спиновое состояние частицы не влияет на её пространственное движение, в этом случае спиновая часть гамильтониана коммутируют с координатной.

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}_{\hat{H}_{\text{коорд.}}} + \hat{H}_S, \quad [\hat{H}_S, \hat{H}_{\text{коорд.}}] = 0.$$

Мы можем считать, что $\hat{H}_S = 0$ без потери общности¹¹.

Координатную часть гамильтониана мы распишем, как обычно в задаче двух тел, через суммарный импульс $\hat{\mathbf{p}}$ и импульс относительного движения $\hat{\mathbf{p}}'$:

$$\hat{H}_{\text{коорд.}} = \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{4m}}_{\hat{H}_{\text{ц.м.}}} + \underbrace{\frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{m}}_{\hat{H}_{\text{отн.}}} + V(\mathbf{r}).$$

Волновая функция системы из двух тождественных частиц зависит от координат и проекций спина на ось z . Рассмотрим случай, когда в состоянии с определённой энергией определено также значение энергии движения центра масс $E_{\text{ц.м.}}$ (собственное число наблюдаемой $\hat{H}_{\text{ц.м.}}$) и можно выделить множитель, зависящий только от радиус-вектора центра масс \mathbf{R} :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, m_1^s; \mathbf{r}_2, m_2^s) = \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \psi_{\text{ц.м.}}(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s).$$

$\psi_{\text{ц.м.}}(\mathbf{R})$ — это стационарное состояние свободной частицы массы $2m$. Далее нас интересует только волновая функция $\psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s)$.

Оператор перестановки новых координатах частиц действует так:

$$\hat{P}_{12} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \Psi(\mathbf{R}, -\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = (-1)^{2s} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, m_1^s, m_2^s).$$

Если волновая функция факторизована, то оператор перестановки частиц не действует на множитель, описывающий движение центра масс:

$$\hat{P}_{12} \psi_{\text{ц.м.}}(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \psi_{\text{ц.м.}}(\mathbf{R}) \psi(-\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = (-1)^{2s} \psi_{\text{ц.м.}}(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s).$$

10.6.1 Факторизуемая волновая функция

Рассмотрим сначала случай когда волновая функция $\psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s)$ тоже факторизуема, т. е. раскладывается на множители

$$\psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \phi(\mathbf{r}) \chi(m_1^s, m_2^s).$$

Если волновая функция факторизована на координатную и спиновую часть, то оператор перестановки частиц на координатную часть действует как оператор координатной инверсии (\hat{I}), а на спиновую — путём перестановки спиновых аргументов (\hat{P}^s):

$$\hat{P}_{12} \phi(\mathbf{r}) \chi(m_1^s, m_2^s) = \underbrace{\hat{I} \phi(\mathbf{r})}_{\hat{P}^s \chi(m_1^s, m_2^s)} \underbrace{\chi(m_1^s, m_2^s)}_{\hat{P}^s \chi(m_1^s, m_2^s)} = (-1)^{2s} \phi(\mathbf{r}) \chi(m_1^s, m_2^s).$$

Факторизуемая собственная функция унитарного оператора $\hat{P}_{12} = \hat{I} \hat{P}^s$ должна быть одновременно собственной функцией унитарных операторов \hat{I} и \hat{P}^s . Поскольку $\hat{I}^2 = \hat{1}$, $(\hat{P}^s)^2 = \hat{1}$, собственные числа операторов \hat{I} и \hat{P}^s — ± 1 .

В качестве базисных спиновых состояний с определённой чётностью удобно выбрать состояния χ_{SM} с определённым суммарным спином $S(S+1)$ и его проекцией M и чётностью $(-1)^{2s-S}$. При этом чётность координатной части $\phi(\mathbf{r})$ должна составлять¹² $(-1)^S$, чтобы чётность функции $\psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s)$ составила $(-1)^{2s}$.

Асимптотика имеет вид:

$$\psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty, m_1^s, m_2^s) = \left[\left(e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right) + (-1)^S \left(e^{-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(-\mathbf{k}_0, -\mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right) \right] \chi_{SM}(m_1^s, m_2^s). \quad (10.36)$$

Асимптотика для координатной волновой функции:

$$\phi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = \left(e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right) + (-1)^S \left(e^{-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(-\mathbf{k}_0, -\mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right). \quad (10.37)$$

Амплитуда $f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ может быть получена путём решения задачи рассеяния для гамильтониана

$$\hat{H}_{\text{отн.}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}'^2}{m} + V(\mathbf{r}),$$

т. е. для частицы массы $\mu = \frac{m}{2}$ в потенциале $V(\mathbf{r})$.

¹¹Даже если $\hat{H}_S \neq 0$, то спиновая система всё равно не взаимодействует с координатной ($[\hat{H}_S, \hat{H}_{\text{коорд.}}] = 0$). Мы можем перейти в представление взаимодействия, положив $\hat{H}_0 = \hat{H}_S$ (т. е. мы можем спиновую подсистему рассматривать в представлении Гайзенберга, а координатную — в представлении Шрёдингера), после чего уравнение Шрёдингера в представлении взаимодействия совпадёт с уравнением Шрёдингера в представлении Шрёдингера при $\hat{H}_S = 0$.

¹²Мы уже знаем из глав 4 и 8, вне зависимости от того, являются ли частицы бозонами или фермионами, если суммарный спин двух частиц определён, то чётность координатной функции двух частиц по отношению к перестановке координат частиц равна $(-1)^S$.

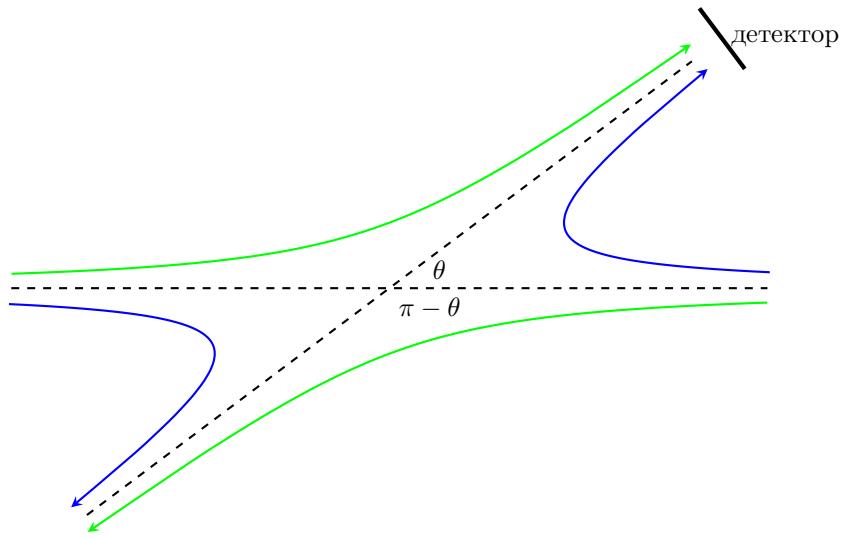


Рис. 10.3: Два неразличимых варианта рассеяния тождественных частиц

При столкновении двух тождественных частиц в принципе невозможно сказать, какая из них попала в детектор. Поэтому в системе центра инерции случаи рассеяния на угол θ и на угол $\pi - \theta$ в принципе неразличимы и вместо сложение вероятностей (сечений) надо складывать амплитуды (см. рис. 10.3):

$$d\sigma_S = |f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) + (-1)^S f(-\mathbf{k}_0, -\mathbf{k})|^2 d\Omega, \quad (10.38)$$

$$\begin{aligned} d\sigma_S &= |f(\phi, \theta) + (-1)^S f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2 d\Omega = \\ &= \left(\underbrace{|f(\phi, \theta)|^2}_{\text{1-я частица}} + \underbrace{|f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2}_{\text{2-я частица}} + \underbrace{(-1)^S 2 \operatorname{Re}[f(\phi, \theta) f^*(\phi + \pi, \pi - \theta)]}_{\text{интерференционный член}} \right) d\Omega. \end{aligned}$$

10.6.2 Рассеяние неполяризованных пучков

Размерность пространства спиновых состояний может быть легко получена в базисе $|s, m_{s1}\rangle |s, m_{s2}\rangle$ как $(2s + 1)^2$. Понятно, что в базисе $|S, M\rangle$ размерность та же самая:

$$N = \sum_{S=0}^{2s} \sum_{M=-S}^S 1 = \sum_{S=0}^{2s} (2S + 1) = \frac{(4s + 2)(2s + 1)}{2} = (2s + 1)^2.$$

Для неполяризованных частиц сечение рассеяния получается усреднением по всем спиновым состояниям:

$$d\sigma = \frac{1}{N} \sum_{S=0}^{2s} \sum_{M=-S}^S d\sigma_S = \frac{1}{N} \sum_{S=0}^{2s} (2S + 1) d\sigma_S = \frac{1}{N} \left(\sum_{S=0, \text{ чёт.}}^{2s} (2S + 1) \right) d\sigma_0 + \frac{1}{N} \left(\sum_{S=1, \text{ нечёт.}}^{2s} (2S + 1) \right) d\sigma_1.$$

Для целого s

$$\sum_{S=0, \text{ чёт.}}^{2s} (2S + 1) = \sum_{k=0}^s (4k + 1) = \frac{(4s + 2)(s + 1)}{2} = (2s + 1)(s + 1).$$

Для полуцелого s

$$\sum_{S=0, \text{ чёт.}}^{2s} (2S + 1) = \sum_{k=0}^{s-\frac{1}{2}} (4k + 1) = \frac{(4s)(s + \frac{1}{2})}{2} = (2s + 1)s.$$

$$d\sigma = \frac{s+1}{2s+1} d\sigma_{2s} + \frac{s}{2s+1} d\sigma_{2s-1} = \left(|f(\phi, \theta)|^2 + |f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2 + \frac{(-1)^{2s}}{2s+1} 2 \operatorname{Re}[f(\phi, \theta) f^*(\phi + \pi, \pi - \theta)] \right) d\Omega.$$

По мере роста s коэффициент при интерференционном члене уменьшается и остаются два члена связанные с тем, что мы не знаем какая из двух частиц попала в детектор.

10.6.3 Рассеяние поляризованных пучков

Дифференциальные сечения для состояний с определённым суммарным спином (10.38) — это частный случай сечений рассеяния поляризованных пучков. Но большинство состояний базиса $|S, M\rangle$ не faktorизуемы, т. е. не могут быть представлены в виде тензорного произведения состояний первого спина и второго спина. В этом базисе faktorизуемо только состояния $|2s, \pm 2s\rangle = |s, \pm s\rangle |s, \pm s\rangle$. Только для этих состояний можно отдельно приготовить частицы первого пучка, и отдельно — второго пучка. В остальных состояниях $|S, M\rangle$ спины двух частиц скоррелированы. А значит **каждую пару** сталкивающихся частиц надо приготовлять специальным образом. Например, если мы хотим столкнуть пару электронов в синглетном состоянии $|0, 0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}$, то мы сначала можем поместить электроны в основное состояние потенциальной ямы, а потом выключить поле, создающее яму, после чего развести электроны и столкнуть. Такие скоррелированные столкновения достаточно сложно реализовать, поэтому обычно ограничиваются случаем faktorизуемых спиновых состояний.

Пусть мы решили стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}_{\text{отн.}} \psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{m}}_E \psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s)$$

не обращая внимания на (анти)симметрию по отношению к перестановке частиц. Решение может быть найдено в виде

$$\psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \phi(\mathbf{r}) \chi(m_1^s, m_2^s).$$

Здесь

$$\hat{H}_{\text{отн.}} \phi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{m} \phi(\mathbf{r}),$$

а спиновая волновая функция $\chi(m_1^s, m_2^s)$ совершенно произвольна.

Функцию ϕ выберем так, чтобы она удовлетворяла асимптотике (10.2)

$$\phi(\mathbf{r} \rightarrow \infty) = \underbrace{e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}}_{\psi_{\text{пад.}}} + \underbrace{\frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr}}_{\psi_{\text{расс.}}} \Rightarrow \psi(\mathbf{r} \rightarrow \infty, m_1^s, m_2^s) = \left(e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right) \chi(m_1^s, m_2^s). \quad (10.39)$$

С учётом того, что для бозонов (фермионов) допустимы только симметричные (антисимметричные) решения, волновую функцию следует симметризовать (антисимметризовать):

$$\psi_{\text{симм.}} = \psi(\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) + (-1)^{2s} \psi(-\mathbf{r}, m_1^s, m_2^s) = \phi(\mathbf{r}) \chi(m_1^s, m_2^s) + (-1)^{2s} \phi(-\mathbf{r}) \chi(m_1^s, m_2^s).$$

Для асимптотики получаем

$$\psi_{\text{симм.}}(\mathbf{r} \rightarrow \infty, m_1^s, m_2^s) = \left(e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right) \chi(m_1^s, m_2^s) + (-1)^{2s} \left(e^{-i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} + \frac{f(-\mathbf{k}_0, -\mathbf{k})}{r} e^{ikr} \right) \chi(m_1^s, m_2^s).$$

Нормировочный коэффициент не возникает, так как мы нормируем на плотность частиц в падающем пучке.

В случае $|\chi\rangle = |s, m_{s1}\rangle |s, m_{s2}\rangle$ при $m_{s1} \neq m_{s2}$ интерференционный член исчезает:

$$d\sigma_\chi = \left(|f(\phi, \theta)|^2 + |f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2 \right) d\Omega.$$

Исчезновение интерференционного члена связано с тем, что частицы в этом процессе становятся различными: по проекции спина мы можем сказать частица из какого пучка попала в детектор.

В случае $|\chi\rangle = |s, m_{s1}\rangle |s, m_{s1}\rangle$ спиновая волновая функция χ оказывается чётной, волновая функция faktorизуется

$$\begin{aligned} d\sigma_\chi &= \left(|f(\phi, \theta) + (-1)^{2s} f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2 \right) d\Omega = \\ &= \left(|f(\phi, \theta)|^2 + |f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2 + (-1)^{2s} 2 \operatorname{Re} [f(\phi, \theta) f^*(\phi + \pi, \pi - \theta)] \right) d\Omega. \end{aligned}$$

(Ф!) При рассеянии тождественных частиц с одинаковыми проекциями спина попадание в датчик одной или другой частицы — в принципе не различимые события и мы складываем амплитуды вероятностей (амплитуды рассеяния) При рассеянии тождественных частиц с разными проекциями спина попадание в датчик одной или другой частицы в принципе различимы (частицы «помечены» разными проекциями спина и оказываются различимыми) и мы складываем уже плотности вероятностей (дифференциальные сечения рассеяния).

Для неполяризованный пучков мы можем усреднить по всем состояниям вида $|\chi\rangle = |s, m_{s1}\rangle |s, m_{s2}\rangle$. При этом $m_{s1} = m_{s2}$ в одном случае из $2s + 1$, поэтому получаем тот же результат, который мы получили выше при усреднении по суммарному спину:

$$d\sigma = \left(|f(\phi, \theta)|^2 + |f(\phi + \pi, \pi - \theta)|^2 + \frac{(-1)^{2s}}{2s + 1} 2 \operatorname{Re} [f(\phi, \theta) f^*(\phi + \pi, \pi - \theta)] \right) d\Omega.$$

Глава 11

Основы теории излучения

Мы будем рассматривать взаимодействие электромагнитного излучения с электрическими зарядами как малое возмущение, т. е. гамильтониан системы будет состоять из трёх частей

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{частиц}} + \hat{H}_{\text{св.поле}} + \hat{V}_{\text{вз.}}$$

которые описывают систему зарядов, взаимодействующих электростатически $\hat{H}_{\text{частиц}}$, свободное (без взаимодействия с зарядами) волновое электромагнитное поле $\hat{H}_{\text{св.поле}}$ и взаимодействие зарядов с волновым полем, которое мало и может рассматриваться как возмущение $\hat{V}_{\text{вз.}}$.

11.1 Калибровка Кулона

Электромагнитное поле появляется в двух частях нашего гамильтониана: электростатическое поле в гамильтониане $\hat{H}_{\text{частиц}}$ и волновое поле в $\hat{H}_{\text{св.поле}}$. Поэтому в первую очередь следует выяснить как осуществить такое разделение.

Для этого мы используем *калибровочное условие Кулона* (*калибровку Кулона*):

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (11.1)$$

Наложение кулоновской калибровке не фиксирует потенциалы однозначно. Оно оставляет возможность осуществлять *остаточные калибровочные преобразования* (5.8) с функцией $f(t, \mathbf{r})$, удовлетворяющей условию

$$\Delta f(t, \mathbf{r}) = 0. \quad (11.2)$$

Напомним, как получаются уравнения электромагнитного поля в кулоновской калибровке. Подставим определение тензора электромагнитного поля через 4-потенциал во вторую пару уравнений Максвелла в 4-мерной форме:

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i, \quad A_i = (-\varphi, \mathbf{A}), \quad \partial_j F^{ij} = \frac{4\pi}{c} j^i, \quad j^i = (c\rho, \mathbf{j}), \quad \partial_j (\partial^i A^j - \partial^j A^i) = \frac{4\pi}{c} j^i.$$

После наложения калибровки Кулона получаем уравнение на скалярную и векторную части 4-потенциала:

$$\Delta\varphi = -4\pi\rho, \quad (11.3)$$

$$\square\mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c}\mathbf{j} + \frac{1}{c}\operatorname{grad}\frac{\partial\varphi}{\partial t}. \quad (11.4)$$

Уравнение (11.3) позволяет определить скалярный потенциал в некоторый момент времени t по распределению зарядов в тот же момент времени t . Получается, что φ выражается через степени свободы, описывающие движение электрически заряженных частиц:

$$\varphi(t, \mathbf{r}) = \int \frac{\rho(t, \mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}. \quad (11.5)$$

(!) Поле φ в *калибровке Кулона* не является динамическим, никакие степени свободы в ним не связаны. Можно сказать, что скалярный потенциал «привязан» к зарядам и обеспечивает их мгновенное кулоновское взаимодействие.

Рассмотрим теперь уравнение на векторный потенциал в калибровке Кулона. Это уже типичное уравнение динамики:

$$\frac{1}{c^2} \underbrace{\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2}}_{\text{«ускорение»}} = \underbrace{\Delta \mathbf{A}}_{\text{«упругая сила»}} + \underbrace{\frac{4\pi}{c} \mathbf{j} - \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t}}_{\text{«внешняя сила»}}.$$

И это уравнение можно буквально рассматривать как описание ансамбля гармонических осцилляторов под действием внешних сил. Каждый гармонический осциллятор — это собственное колебание электромагнитного поля (например, бегущая или стоячая волна), а обобщённые внешние силы полностью выражаются через ρ и \mathbf{j} , т. е. описывают взаимодействие электромагнитных волн с заряженными частицами.

Взаимодействие волнового поля с частицами предполагается малым и будет рассмотрено по теории возмущений, а сейчас мы перейдём к собственным колебаниям электромагнитного поля, описываемым уравнением без внешних сил

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = \Delta \mathbf{A}, \quad (11.6)$$

и квантованию этих колебаний (как системы гармонических осцилляторов).

11.2 Разложение свободного электромагнитного поля на осцилляторы

Рассмотрим электромагнитное поле периодическое по всем трём координатным осям:

$$A(t, x, y, z) = A(t, x + \ell_x, y, z) = A(t, x, y + \ell_y, z) = A(t, x, y, z + \ell_z).$$

Мы будем рассматривать поле в конечном ящике размером $\ell_x \times \ell_y \times \ell_z$. Рассмотрение поля в ящике удобно тем, что вместо интеграла Фурье поля разлагается в ряд Фурье, после чего можно перейти к пределу бесконечного ящика. Получившийся ящик с периодическими граничными условиями не привносит краевых эффектов, что видно из того, что его можно произвольно сдвигать параллельно осям координат, кроме того в таком ящике возможны собственные колебания в виде не только стоячих, но и бегущих волн.

Собственное колебание электромагнитного поля можно найти в виде бегущей волны:

$$\varphi \equiv 0, \quad A(t, \mathbf{r}) = \operatorname{Re} \left(\mathbf{a}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \right).$$

Здесь \mathbf{a}_0 — вектор комплексной амплитуды. Из калибровочного условия Кулона следует поперечность волны:

$$(\mathbf{k}, \mathbf{a}_0) = 0.$$

Из условий периодичности следует, что волновой вектор должен принадлежать *обратной решётке*:

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = \left(\frac{2\pi}{\ell_x} n_x, \frac{2\pi}{\ell_y} n_y, \frac{2\pi}{\ell_z} n_z \right), \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbb{Z}. \quad (11.7)$$

Мы видим, что одно состояние в пространстве векторов \mathbf{k} приходится на объём $\frac{(2\pi)^3}{\ell_x \ell_y \ell_z} = \frac{(2\pi)^3}{V}$. Так что для большого ящика число состояний в объёме $d^3 k$ получается

$$dN = \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{V k^2 d\Omega dk}{(2\pi)^3} = \frac{V E^2 d\Omega dE}{(2\pi \hbar c)^3}, \quad E = c\hbar k.$$

Поделив на dE получаем энергетическую плотность состояний в элементе телесного угла:

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{V E^2 d\Omega}{(2\pi \hbar c)^3} \quad (11.8)$$

Из волнового уравнения (11.6) следует *дисперсионное соотношение* (соотношение между волновым вектором и частотой):

$$\omega = c|\mathbf{k}|.$$

Чтобы увидеть динамику переопределим амплитуду так, чтобы она зависела от времени:

$$A(t, \mathbf{r}) = \operatorname{Re} (\mathbf{a}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}) = \operatorname{Re} (\mathbf{e} a(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad \mathbf{a}(t) = \mathbf{e} a(t) = \underbrace{\mathbf{e} |\mathbf{a}_0| e^{i\alpha}}_{\mathbf{a}_0} e^{-i\omega t}.$$

Здесь $e^{i\alpha}$ — произвольный фазовый множитель.

Мы выделили комплексный вектор поляризации \mathbf{e} , удовлетворяющий нормировочному условию¹

$$(\mathbf{e}^*, \mathbf{e}) = \operatorname{Re}^2 \mathbf{e} + \operatorname{Im}^2 \mathbf{e} = \langle \mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle = 1.$$

¹ Для трёхмерных вектором мы используем скалярное произведение без комплексного сопряжения если скобки круглые (\cdot, \cdot) и с комплексным сопряжением первого множителя, если скобки угловые $\langle \cdot, \cdot \rangle$.

Также мы выделили скалярную комплексную амплитуду, которая и зависит от времени

$$a(t) = |\mathbf{a}_0| e^{i\alpha} e^{-i\omega t}.$$

Комплексная амплитуда удовлетворяет дифференциальному уравнению, которое можно переписать как систему уравнений на её вещественную и мнимую части:

$$\dot{a} = -i\omega a \Leftrightarrow \begin{cases} \operatorname{Re} \dot{a} = \omega \operatorname{Im} a, \\ \operatorname{Im} \dot{a} = -\omega \operatorname{Re} a. \end{cases} \quad (11.9)$$

Система (11.9) соответствует системе уравнений Гамильтона для гармонического осциллятора, если в роли координаты и импульса взять $q = C \operatorname{Re} a$ и $p = C \operatorname{Im} a$. Надо только подобрать коэффициент пропорциональности C так, чтобы энергия волны в точности равнялась функции Гамильтона осциллятора.

Удобно массовый коэффициент подобрать такой, чтобы условие $H(q, p) = \text{const}$ задавало окружность:

$$H(q, p) = \omega \frac{q^2 + p^2}{2} = \omega \frac{C^2}{2} a^* a = \mathcal{E}_{\text{эм.}} = \int \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2}{8\pi} dV = \int \frac{\mathbf{E}^2}{4\pi} dV.$$

В плоской бегущей волне всюду $|\mathbf{E}| = |\mathbf{B}|$, так что энергию магнитного поля можно отдельно не считать.

$$\mathbf{E} = \underbrace{-\frac{1}{c} \operatorname{grad} \varphi}_{0} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \operatorname{Re}(\mathbf{e} a(t) \frac{i\omega}{c} e^{i\mathbf{kr}}) = \operatorname{Re}(\mathbf{e}) |\mathbf{a}_0| \frac{\omega}{c} \sin(\omega t - \mathbf{kr} - \alpha) - \operatorname{Im}(\mathbf{e}) |\mathbf{a}_0| \frac{\omega}{c} \cos(\omega t - \mathbf{kr} - \alpha).$$

$$\langle \mathbf{E}^2 \rangle_{\text{усреднение по ящику}} = \frac{1}{2} |\mathbf{a}_0|^2 \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{\omega^2}{2c^2} a^*(t) a(t).$$

Так что энергия электромагнитной волны

$$\mathcal{E}_{\text{эм.}} = \frac{V\omega^2}{8\pi c^2} a^*(t) a(t) \Rightarrow C = \sqrt{\frac{V\omega}{4\pi c^2}}, \quad V = \ell_x \ell_y \ell_z.$$

Обозначим

$$A = \frac{q + ip}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{V\omega}{8\pi c^2}} a(t).$$

Теперь функцию Гамильтона и векторный потенциал для бегущей волны можно записать как

$$H(q, p) = \omega \frac{q^2 + p^2}{2} = \omega A^* A, \quad (11.10)$$

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{r}) = \sqrt{\frac{8\pi c^2}{V\omega}} \operatorname{Re}(\mathbf{e} a(t) e^{i\mathbf{kr}}) = \sqrt{\frac{2\pi c^2}{V\omega}} (\mathbf{e} A(t) e^{i\mathbf{kr}} + \mathbf{e}^* A^*(t) e^{-i\mathbf{kr}}). \quad (11.11)$$

Мы нашли векторный потенциал и функцию Гамильтона для единичного собственного колебания. Легко проверить, что если рассмотреть волны с разными волновыми векторами вида (11.7), то их энергии складываются. Также складываются энергии если волны имеют одинаковые волновые векторы и ортогональные векторы поляризации $\langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle = 0$. Таким образом, мы можем ввести базис линейно независимых собственных колебаний и разложить по нему колебания поля в ящике:

$$\mathbf{A}(t, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} A_{\mathbf{k}, \lambda}(t) e^{i\mathbf{kr}} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* A_{\mathbf{k}, \lambda}^*(t) e^{-i\mathbf{kr}}), \quad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|, \quad (11.12)$$

$$H_{\text{эм. поля}}(q_{\mathbf{k}, \lambda}, p_{\mathbf{k}, \lambda}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \omega_{\mathbf{k}} \frac{q_{\mathbf{k}, \lambda}^2 + p_{\mathbf{k}, \lambda}^2}{2} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \omega_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}, \lambda}^* A_{\mathbf{k}, \lambda}, \quad A_{\mathbf{k}, \lambda} = \frac{q_{\mathbf{k}, \lambda} + ip_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{2}}. \quad (11.13)$$

Здесь \mathbf{k} пробегает все значения вида (11.7), $\lambda \in \{1, 2\}$ нумерует поляризации при данном волновом векторе

$$\langle \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda_1}, \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda_2} \rangle = \delta_{\lambda_1 \lambda_2}.$$

Разложение (11.12) — это просто разложение векторного потенциала в ящике в ряд Фурье, а гамильтониан (11.13) — гамильтониан системы классических невзаимодействующих осцилляторов.

11.3 Квантование свободного электромагнитного поля

Чтобы проквантовать электромагнитное поле в ящике надо просто надеть шляпки в формулах (11.12) и (11.13):

$$\hat{\mathbf{A}}_{\text{ш}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{A}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i\mathbf{kr}} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* \hat{A}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{-i\mathbf{kr}} \right), \quad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}| \quad (11.14)$$

(индекс «ш» означает шрёдингеровское представление),

$$\hat{H}_{\text{э.м. поля}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \omega_{\mathbf{k}} \frac{\hat{q}_{\mathbf{k}, \lambda}^2 + \hat{p}_{\mathbf{k}, \lambda}^2}{2}, \quad \hat{A}_{\mathbf{k}, \lambda} = \frac{\hat{q}_{\mathbf{k}, \lambda} + i\hat{p}_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{2}}. \quad (11.15)$$

Удобно ввести обезразмеренные импульсы и повышающие-понижающие операторы, как для гармонического осциллятора:

$$\hat{Q}_{\mathbf{k}, \lambda} = \frac{\hat{q}_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{\hbar}}, \quad \hat{P}_{\mathbf{k}, \lambda} = \frac{\hat{p}_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{\hbar}}, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda} = \frac{\hat{Q}_{\mathbf{k}, \lambda} + i\hat{P}_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{2}} = \frac{\hat{A}_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{\hbar}}, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ = \frac{\hat{Q}_{\mathbf{k}, \lambda} - i\hat{P}_{\mathbf{k}, \lambda}}{\sqrt{2}} = \frac{\hat{A}_{\mathbf{k}, \lambda}^+}{\sqrt{\hbar}}.$$

Операторы $\hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^{\pm}$ удовлетворяют обычным бозонным коммутационным соотношениям и являются *операторами рождения и уничтожения фотонов*:

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}_1, \lambda_1}, \hat{b}_{\mathbf{k}_2, \lambda_2}^+] = \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}, \quad [\hat{b}_{\mathbf{k}_1, \lambda_1}, \hat{b}_{\mathbf{k}_2, \lambda_2}] = [\hat{b}_{\mathbf{k}_1, \lambda_1}^+, \hat{b}_{\mathbf{k}_2, \lambda_2}] = 0.$$

Теперь векторный потенциал и гамильтониан приобретают вид

$$\hat{\mathbf{A}}_{\text{ш}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i\mathbf{kr}} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{-i\mathbf{kr}} \right), \quad \omega_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|, \quad (11.16)$$

$$\hat{H}_{\text{э.м. поля}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \frac{\hat{Q}_{\mathbf{k}, \lambda}^2 + \hat{P}_{\mathbf{k}, \lambda}^2}{2} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\underbrace{\hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}}_{\hat{n}_{\mathbf{k}, \lambda}} + \frac{1}{2} \right) = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}, \lambda}}_{\text{энергия всех фотонов}} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}}_{\text{энергия вакуума} = +\infty}. \quad (11.17)$$

Наимизшая собственная энергия электромагнитного поля (энергия вакуума) оказывается бесконечной и мы её просто отбрасываем², поскольку эта энергия — константа (хотя и бесконечная), а к энергии всегда можно добавить константу.

После отбрасывания (перенормировки) энергии вакуума гамильтониан принимает вид

$$\hat{H}_{\text{э.м. поля}} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \frac{\hat{Q}_{\mathbf{k}, \lambda}^2 + \hat{P}_{\mathbf{k}, \lambda}^2 - 1}{2} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}, \lambda}^+ b_{\mathbf{k}, \lambda} = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}, \lambda}. \quad (11.18)$$

Для применения нестационарной теории возмущений векторный потенциал надо переписать в представлении взаимодействия, отнеся к невозмущённому гамильтониану гамильтониан частиц + гамильтониан волнового поля. Полевые операторы в представлении взаимодействия в данном случае совпадают с полевыми операторами в представлении Гайзенберга:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{\text{г.в.}}(t, \mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}(t) e^{i\mathbf{kr}} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^+(t) e^{-i\mathbf{kr}} \right) = \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr})} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{i(\omega t - \mathbf{kr})} \right). \end{aligned} \quad (11.19)$$

В первой строчке формулы (11.19) используются операторы рождения и уничтожения в представлении Гайзенберга (или в представлении взаимодействия), а во второй строке — в представлении Шрёдингера.

²Это называется *перенормировкой энергии бозонного вакуума*.

11.4 Взаимодействие электромагнитного поля с источниками

Чтобы добавить в гамильтониан частиц взаимодействие с внешним электромагнитным полем мы можем, как и раньше, просто удлинить импульсы (или производные) как в (5.2), только теперь векторный потенциал тоже становится оператором (11.19):

$$\hat{p}_i = \left(-\frac{\dot{\mathcal{E}}}{c}, \underbrace{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z}_{\hat{\mathbf{p}}} \right) \rightarrow \hat{\mathcal{P}}_i := \left(\hat{P}_0 + \frac{q}{c} \underbrace{\varphi}_{-A_0}, \hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right). \quad (11.20)$$

Обратите внимание, мы надели шляпку на векторный потенциал, но не на скалярный, потому, что скалярным потенциалом в калибровке Кулона не связаны дополнительные степени свободы. Впрочем, взаимодействие со скалярным потенциалом у нас будет возникать ещё в невозмущённом гамильтониане для частиц, так что в данном случае достаточно удлинить пространственные импульсы:

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathcal{P}} := \hat{\mathbf{P}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}}.$$

Так что если у нас был гамильтониан частиц $\hat{H}_q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}})$, то взаимодействие с электромагнитным излучением вводится так:

$$\hat{H}_q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}) \rightarrow \hat{H}_q(\mathbf{r}, \hat{\mathcal{P}}) + \hat{H}_{\text{э.м.поля}} = \underbrace{\hat{H}_q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}) + \hat{H}_{\text{э.м.поля}}}_{\hat{H}_0} + \underbrace{\hat{V}_{\text{взаимодействия}}}_{\hat{H}_q(\mathbf{r}, \hat{\mathcal{P}}) - \hat{H}_q(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}})}.$$

В тех случаях, где мы уже получили гамильтонианы для частиц, взаимодействующих с классическим электромагнитным полем, достаточно надеть на векторные потенциалы шляпки, т. е. взять их в форме (11.19) и добавить гамильтониан свободного электромагнитного поля (11.18).

Мы рассмотрим систему нерелятивистских частиц с массами m_a , зарядами q_a и пропорциональными спинам магнитными моментами, задаваемыми гиромагнитными отношениями g_a :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_a \left[\frac{(\hat{\mathbf{P}}_a - \frac{q_a}{c} \hat{\mathbf{A}}_a)^2}{2m_a} + U(\mathbf{r}_a) - g_a \frac{q_a \hbar}{2m_a c} (\hat{\mathbf{s}}_a, \text{rot } \hat{\mathbf{A}}_a) \right] + \sum_{a < b} U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) + \hat{H}_{\text{э.м.поля}} = \\ &= \underbrace{\sum_a \left[\frac{\hat{\mathbf{P}}_a^2}{2m_a} + U(\mathbf{r}_a) \right]}_{\hat{H}_0} + \sum_{a < b} U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) + \hat{H}_{\text{э.м.поля}} + \underbrace{\sum_a \left[\frac{q_a^2 \hat{\mathbf{A}}_a^2}{2m_a c^2} - q_a \frac{(\hat{\mathbf{P}}_a, \hat{\mathbf{A}}_a)}{m_a c} - g_a \frac{q_a \hbar}{2m_a c} (\hat{\mathbf{s}}_a, \text{rot } \hat{\mathbf{A}}_a) \right]}_{\hat{V}_{\text{вз}}}. \end{aligned} \quad (11.21)$$

Здесь a — номер частицы, $\hat{\mathbf{A}}_a := \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_a)$. Мы воспользовались тем, что

$$(\hat{\mathbf{P}}_a, \hat{\mathbf{A}}_a) - (\hat{\mathbf{A}}_a, \hat{\mathbf{P}}_a) = -i\hbar \underbrace{\text{div } \hat{\mathbf{A}}_a = 0}_{\text{калибровка Кулона}}.$$

11.5 Дипольное приближение

Взаимодействие системы нерелятивистских заряженных дираковских частиц с электромагнитным излучением описывается оператором (11.21)

$$\hat{V}_{\text{вз}} = \underbrace{\sum_a -q_a \frac{(\hat{\mathbf{P}}_a, \hat{\mathbf{A}}_a)}{m_a c}}_{\hat{V}_1} + \underbrace{\sum_a \frac{q_a^2 \hat{\mathbf{A}}_a^2}{2m_a c^2}}_{\hat{V}_2} + \underbrace{\sum_a -g_a \frac{q_a \hbar}{2m_a c} (\hat{\mathbf{s}}_a, \text{rot } \hat{\mathbf{A}}_a)}_{\hat{V}_3}, \quad (11.22)$$

где, согласно (11.16),

$$\hat{\mathbf{A}}_a = \hat{\mathbf{A}}_{\text{ши}}(\mathbf{r}_a) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} + \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \right). \quad (11.23)$$

Члены разложения — это просто фурье-гармоники векторного потенциала, в которых амплитуды \hat{b}^{\pm} ставшие операторами рождения-уничтожения фотонов.

Посмотрим на эти члены внимательнее:

- $\mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_a}$

- $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ — комплексный вектор поляризации,
- $\hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}$ — оператор уничтожения фотона с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$,
- $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_a}$ — оператор сдвига по импульсу заряженной частицы с номером a на импульс поглощённого фотона $\hbar\mathbf{k}$ (здесь \mathbf{k} — вектор с числовыми компонентами, а \mathbf{r}_a — оператор).
- $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a}$
 - $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ — комплексно сопряжённый вектор поляризации,
 - $\hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+$ — оператор рождения фотона с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$,
 - $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a}$ — оператор сдвига по импульсу заряженной частицы с номером a на минус импульс излучённого фотона $-\hbar\mathbf{k}$.

В члене \hat{V}_1 векторный потенциал в точке \mathbf{r}_a скалярно умножается на импульс частицы $\hat{\mathbf{P}}_a$. В разложении поля на осцилляторы это даёт скалярные произведения вида

$$(\hat{\mathbf{P}}_a, \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}), \quad (\hat{\mathbf{P}}_a, \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*) = (\hat{\mathbf{P}}_a, \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})^+.$$

То есть взаимодействие \hat{V}_1 частицы с модой колебаний (бегущей волной) электромагнитного поля оказывается пропорциональным проекции её импульса на вектор поляризации этой волны.

Оценим три члена возмущения (11.22).

Оценим вектор-потенциал через характерное внешнее электрическое поле:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \hat{\mathbf{A}}}{\partial t} \Rightarrow E \sim \frac{\omega}{c} A, \quad A \sim \frac{c}{\omega} E,$$

Характерное значение V_1 соответствует работе, совершающей силой, со стороны внешнего поля на расстоянии порядка длины волны, умноженной на малый фактор $\frac{v}{c}$:

$$V_1 \sim |q| \frac{PA}{mc} \sim |q| \frac{v}{c} \frac{c}{\omega} E \sim F_{\text{внеш}} \lambda \frac{v}{c}.$$

Характерное значение V_2

$$V_2 \sim \frac{q^2 A^2}{mc^2} \sim \frac{|qE|^2}{mc^2} \frac{c^2}{\omega^2} \sim F_{\text{внеш}} \lambda \frac{F_{\text{внеш}} \lambda}{mc^2}$$

Отношение V_2 к V_1 соответствует отношению работы внешней силы на размере системы к энергии фотона

$$\frac{V_2}{V_1} \sim \frac{F_{\text{внеш}} \lambda / c}{mv} \sim \frac{F_{\text{внеш}} / \omega}{\hbar / R} \sim \frac{F_{\text{внеш}} R}{\hbar \omega}.$$

Если поле не слишком сильное, V_2 можно пренебречь на фоне V_1 .

Характерное значение V_3 соответствует работе характерной внешней силы на комптоновской длине волны:

$$V_3 \sim \frac{|q|\hbar}{mc} E \sim F_{\text{внеш}} \frac{\hbar}{mc} \sim F_{\text{внеш}} \lambda_K.$$

Отношение V_3 к V_1 соответствует отношению размера системы к длине волны. В дипольном приближении (как и в классической электродинамике) мы рассматриваем случай, когда длина волны много больше размера системы:

$$\frac{V_3}{V_1} \sim \frac{F_{\text{внеш}} \frac{\hbar}{mc}}{F_{\text{внеш}} \frac{v}{c} \frac{c}{\omega}} \sim \frac{\hbar \omega}{mc v} \sim \frac{\hbar / mv}{c / \omega} \sim \frac{R}{\lambda}$$

На временах больших, по сравнению с периодом колебаний излучённой волны энергия сохраняется, так что из всей бесконечной суммы (11.23) в первом порядке теории возмущений (в пренебрежении многофотонными процессами) существенны только члены для которых энергия фотона $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \hbar c |\mathbf{k}|$ близка к разности уровней $\hbar\omega_{\text{пер.}}$, между которыми переходит квантовая система.

Рассмотрим процесс излучения квантовой системы удерживая только главный вклад в нерелятивистском пределе.

Пусть квантовая система локализована в области с характерным размером $L \ll \frac{c}{\omega_{\text{пер.}}}$. Таким образом

$$\hat{\mathbf{A}} \approx \hat{\mathbf{A}}_a \approx \sum_{\mathbf{k} \approx \omega_{\text{пер.}}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} \left(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda} + \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ \right). \quad (11.24)$$

Мы удержали в сумме только волновые числа фотонов, с энергией близкой к энергии перехода (с остальными модами колебаний взаимодействуют с нашей системой зарядов слабо).

Также мы положили $e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} \approx 1$, то есть пренебрегли набегом фазы волн на расстояниях порядка L . Поскольку эти экспоненты — операторы сдвига по импульсу, то мы также пренебрегли импульсом, передающимся между электромагнитным полем (фотонами) и заряженными частицами. Передающимся импульсом можно пренебречь потому, что для частицы, локализованной в области размера L неопределенность импульса составляет $\frac{\hbar}{L} \gg \hbar|\mathbf{k}_{\text{пер}}|$.

Магнитное поле оказывается мало $\text{rot } \hat{\mathbf{A}}_a \sim \hat{\mathbf{A}}_a |\mathbf{k}|$ и \hat{V}_3 можно пренебречь.

Поскольку возмущение в некотором смысле мало, малым можно считать заряд частицы q , тогда можно пренебречь вкладом \hat{V}_2 , который имеет порядок q^2 .

У нас остаётся главный член \hat{V}_1

$$\hat{V}_1 = -\frac{1}{c} \left(\hat{\mathbf{A}}, \sum_a \frac{q_a}{m_a} \hat{\mathbf{P}}_a \right) = -\frac{1}{c} \left(\hat{\mathbf{A}}, \underbrace{\frac{d}{dt} \sum_a q_a \mathbf{r}_a}_{\hat{\mathbf{d}}} \right) = -\frac{1}{c} \left(\hat{\mathbf{A}}, \hat{d} \right) = \frac{i}{c\hbar} \left(\hat{\mathbf{A}}, [\hat{\mathbf{d}}, \hat{H}_{\text{u}}] \right),$$

который выражается через электрический дипольный момент.

Применим теперь золотое правило Ферми.

Наша система состоит из системы заряженных частиц и волнового электромагнитного поля, которые в невозмущённом гамильтониане не взаимодействуют. Поэтому начальное и конечное состояния фактически разлагаются как произведения состояния частиц $|\psi_{i,f}\rangle$ и состояния поля $|\chi_{i,f}\rangle$:

$$|i\rangle = |\psi_i\rangle \otimes |\chi_i\rangle, \quad |f\rangle = |\psi_f\rangle \otimes |\chi_f\rangle.$$

Оператор дипольного момента (получившийся из операторов $\hat{\mathbf{P}}_a$) действует только на состояние частиц. После того, как мы пренебрегли координатной зависимостью векторного потенциала оператор $\hat{\mathbf{A}}$ действует только на поле.

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{V}_1 | i \rangle &= \frac{i}{c\hbar} \left(\langle \chi_f | \hat{\mathbf{A}} | \chi_i \rangle, \langle \psi_f | [\hat{\mathbf{d}}, \hat{H}_{\text{u}}] | \psi_i \rangle \right) = \frac{-i\omega_{fi}}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V|\omega_{fi}|}} \langle \chi_f | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda} + \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ | \chi_i \rangle \underbrace{\langle \psi_f | \hat{\mathbf{d}} | \psi_i \rangle}_{\mathbf{d}_{fi}} = \\ &= -i \text{sgn}(\omega_{fi}) \sqrt{\frac{2\pi\hbar|\omega_{fi}|}{V}} \left\{ (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}, \mathbf{d}_{fi}) \langle \chi_f | \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda} | \chi_i \rangle + (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*, \mathbf{d}_{fi}) \langle \chi_f | \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ | \chi_i \rangle \right\}. \end{aligned}$$

Рассмотрим случай спонтанного излучения. В этом случае начальное состояние поля — вакуум $|\chi_i\rangle = |0\rangle$, а в конечном состоянии появляется один фотон $|\chi_f\rangle = |1_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$. Тогда

$$\langle \chi_f | \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda} | \chi_i \rangle = 0, \quad \langle \chi_f | \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ | \chi_i \rangle = \langle 1_{\mathbf{k},\lambda} | \hat{b}_{\mathbf{k},\lambda}^+ | 0 \rangle = 1,$$

$$V_{fi} = -i \text{sgn}(\omega_{fi}) \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_{if}}{V}} (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*, \mathbf{d}_{fi}).$$

Используя полученный матричный элемент и плотность состояний (11.8) получаем вероятность излучения в единицу времени в элемент телесного угла $d\Omega$

$$dW_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho \left(\underbrace{\frac{E_i}{E_f \pm \hbar \frac{\pi}{t}}}_{|V_{fi}|^2} \right) = \frac{2\pi}{\hbar} \underbrace{\frac{2\pi\hbar\omega_{if}}{V} |(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*, \mathbf{d}_{fi})|^2}_{|V_{fi}|^2} \underbrace{\frac{V(\omega_{if}\hbar)^2 d\Omega}{(2\pi\hbar c)^3}}_{\rho(\hbar\omega_{if})} = \frac{\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3} |(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*, \mathbf{d}_{fi})|^2 d\Omega. \quad (11.25)$$

Если просуммировать по поляризациям, то получим

$$\sum_{\lambda=1}^2 dW_{fi} = \frac{\omega_{if}^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}^{\perp}|^2 d\Omega,$$

где значок \perp означает проекцию вектора на плоскость перпендикулярную вектору \mathbf{k} : $\mathbf{a}^{\perp} = \mathbf{a} - \frac{\mathbf{k}(\mathbf{k}, \mathbf{a})}{\mathbf{k}^2} \mathbf{k}$.

Интегрирование по телесному углу даёт вероятность спонтанного излучения в единицу времени в дипольном приближении

$$W_{fi} = \frac{4}{3} \frac{\omega_{if}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2.$$

Средняя интенсивность дипольного излучения получается умножением на энергию одного фотона $\hbar\omega_{if}$:

$$I_d = \frac{4}{3} \frac{\omega_{if}^4}{c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2.$$

11.6 Правила отбора для дипольных переходов

При рассмотрении процесса излучения в дипольном приближении во многих случаях матричный элемент дипольного момента d_{fi} оказывается равным нулю, т. е. оказывается, что дипольное излучение отсутствует (но может присутствовать излучение в следующих порядках). Равенство нулю матричного элемента дипольного момента часто можно выяснить без проведения вычислений из соображений симметрии. Формализованные результаты таких симметрийных рассуждений называются *правилами отбора* для дипольного излучения.

Правила отбора могут быть полезны и в задачах не связанных с излучением (например, в рассмотрении взаимодействия атома с внешним электрическим полем), если в этих задачах приходится вычислять матричные элементы дипольного момента.

Можно обходиться и без правил отбора, просто в этом случае придётся делать много лишних вычислений матричных элементов, которые в итоге окажутся нулями.

Правила отбора зависят от того, какими квантовыми числами нумеруются уровни невозмущённого гамильтониана, а следовательно от его симметрий³.

11.6.1 Отбор по чётности

Все компоненты вектора дипольного момента $\hat{\mathbf{d}} = \sum_a q_a \mathbf{r}_a$ меняют пространственную чётность волновой функции, т. е. превращают чётную функцию в нечётную и наоборот. Легко проверить, что это выражается в том, что оператор пространственной инверсии (собственные числа которого определяют чётность) \hat{I} антисимметрическим относительно компонентами дипольного момента:

$$[\hat{d}_\alpha, \hat{I}]_+ = 0.$$

Отсюда

$$0 = \langle f | [\hat{d}_\alpha, \hat{I}]_+ | i \rangle = \langle f | \hat{d}_\alpha \hat{I} + \hat{I} \hat{d}_\alpha | i \rangle = \langle f | \hat{d}_\alpha P_i + P_f \hat{d}_\alpha | i \rangle = (P_i + P_f) \langle f | \hat{d}_\alpha | i \rangle.$$

Здесь $P_{i,f} = \pm 1$ — пространственная чётность (собственные числа оператора \hat{I}) для начального (i) и конечного (f) состояний.

Следовательно, матричный элемент $\langle f | \hat{d}_\alpha | i \rangle$ может быть отличен от нуля только при условии изменения чётности:

$$P_i = -P_f.$$

(*) Для одной частицы пространственная чётность P определяется через чётность орбитального момента $P = (-1)^l$, но для нескольких частиц это правило уже не работает. Например, пусть есть две частицы с орбитальными моментами $l_1 = l_2 = 1$. Пространственная чётность для каждой частицы равна -1 , а значит для двух частиц — $+1$. При этом суммарный орбитальный момент может принимать значения $L = 0, 1, 2$. При $L = 1$ пространственная чётность системы не определяется значением L , поскольку $+1 \neq (-1)^L$.

11.6.2 Базис $|S, M_S; L, M_L\rangle$

Дипольный момент не зависит от спиновых степеней свободы и, следовательно, коммутирует со спиновыми операторами:

$$[\hat{d}_\alpha, \hat{S}_\beta] = 0, \quad [\hat{d}_\alpha, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0. \quad (11.26)$$

Отсюда

$$0 = \langle f | [\hat{d}_\alpha, \hat{S}_z] | i \rangle = \langle f | \hat{d}_\alpha \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{d}_\alpha | i \rangle = \langle f | \hat{d}_\alpha M_{Si} - M_{Sf} \hat{d}_\alpha | i \rangle = (M_{Si} - M_{Sf}) \langle f | \hat{d}_\alpha | i \rangle.$$

Следовательно, матричный элемент $\langle f | \hat{d}_\alpha | i \rangle$ может быть отличен от нуля только при условии сохранения проекции полного спина:

$$M_{Si} = M_{Sf}.$$

Аналогично из второго коммутатора (11.26) получаем

$$S_i = S_f.$$

Дипольный момент является себя вектором, выражаемым через пространственные координаты и импульсы частиц. Чтобы повернуть этот вектор генераторами поворота служат проекции суммарного орбитального момента систему \hat{L}_α . Коммутатор дипольного и орбитального момента — стандартный коммутатор вектора и генераторов поворота:

$$[\hat{d}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{d}_\gamma.$$

³Так для частицы в потенциальной яме (резонаторе) в форме прямоугольного параллелепипеда квантовые числа будут другие, чем в сферически-симметричном потенциале и большинство правил отбора будут другими.

В частности для z -компонент

$$[\hat{d}_z, \hat{L}_z] = 0$$

Отсюда находим (аналогично примеру $[\hat{d}_\alpha, \hat{S}_\beta] = 0$)

$$0 = (M_{Li} - M_{Lf})\langle f|\hat{d}_z|i\rangle,$$

Следовательно, матричный элемент $\langle f|\hat{d}_z|i\rangle$ может быть отличен от нуля только при условии сохранения проекции полного орбитального момента:

$$M_{Li} = M_{Lf}.$$

От компонент x и y дипольного момента удобно перейти к компонентам \hat{d}_\pm :

$$[\hat{d}_\pm, \hat{L}_z] = [\hat{d}_x \pm i\hat{d}_y, \hat{L}_z] = -i\hat{d}_y \mp \hat{d}_x = \mp(\hat{d}_x \pm i\hat{d}_y) = \mp\hat{d}_\pm$$

Отсюда

$$\langle f|[\hat{d}_\pm, \hat{L}_z]|i\rangle = \langle f|\hat{d}_\pm\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{d}_\pm|i\rangle = \langle f|\hat{d}_\pm M_{Li} - M_{Lf}\hat{d}_\pm|i\rangle = (M_{Li} - M_{Lf})\langle f|\hat{d}_\pm|i\rangle = \mp\langle f|\hat{d}_\pm|i\rangle.$$

Отсюда для \hat{d}_\pm получаем правило отбора

$$M_{Lf} = M_{Li} \pm 1.$$

Так что для M_L в дипольном приближении допустимы только переходы для которых выполнено правило отбора

$$M_{Lf} - M_{Li} \in \{-1, 0, +1\}.$$

Осталось определить правила отбора для L .

В дипольном приближении размер системы мал по сравнению с длиной волны, а значит (см. параграф 10.5 «Фазовая теория рассеяния») орбитальный момент излучённого фотона равен нулю. Спин фотона равен 1, так рассматривая сумму орбитального момента системы и спина фотона после излучения (см. 4 «Сложение моментов») и сравнивая с орбитальным моментом до излучения получаем из сохранения момента импульса правило отбора:

$$L_f - 1 \geq L_i \geq L_f + 1.$$

Переход

$$L_i = L_f = 0$$

запрещён, поскольку начальное и конечное состояние сферически симметричны.

11.6.3 Базис $|S, L; J, M_J\rangle$

Как в предыдущем параграфе, сохраняется правило отбора для суммарного спина

$$S_f = S_i.$$

Для \hat{J}_z имеют место те же коммутационные соотношения, что раньше для \hat{L}_z . Так что M_J получаются аналогичные правила отбора.

Для \hat{d}_z

$$M_{Jf} = M_{Ji}.$$

Для \hat{d}_\pm

$$M_{Jf} = M_{Ji} \pm 1.$$

Так что для M_J в дипольном приближении допустимы только переходы для которых выполнено правило отбора

$$M_{Jf} - M_{Ji} \in \{-1, 0, +1\}.$$

По-прежнему

$$L_f - 1 \geq L_i \geq L_f + 1.$$

И по аналогии, из сохранения момента импульса получаем правило отбора:

$$J_f - 1 \geq J_i \geq J_f + 1.$$

Глава 12

Матрица плотности и теория измерений → КПКМ-4.8,5.3.2,7.4

12.1 Чистые и смешанные состояния → КПКМ-4.8

См. книгу М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику», § 4.8 «Матрица плотности» (стр. 115).

12.2 Селективные и неселективные измерения → КПКМ-5.3.2

См. книгу М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику», § 5.3 «Измерение» (стр. 153) и особенно пункт 5.3.2 «Селективное и неселективное измерение» (стр. 160).

12.3 Квантовый эффект Зенона → КПКМ-7.4

См. книгу М.Г. Иванов «Как понимать квантовую механику», § 7.4 «Квантовый эффект Зенона (парадокс незакипающего чайника)» (стр. 219).