

# QUANTUM MECHANICS

NEW APPROACHES TO SELECTED TOPICS

by

HARRY J. LIPKIN  
The Weizmann Institute of Science  
Rehovoth

NORTH-HOLLAND PUBLISHING COMPANY  
AMSTERDAM · LONDON

AMERICAN ELSEVIER PUBLISHING CO., INC.  
NEW YORK 1973



Г. ЛИПКИН

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

## НОВЫЙ ПОДХОД К НЕКОТОРЫМ ПРОБЛЕМАМ

*Перевод с английского*

под редакцией  
доктора физ.-мат. наук  
В. В. ТОЛМАЧЁВА

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»

МОСКВА 1977

Книга Г. Липкина представляет собой учебник по квантовой механике, в котором своеобразно изложены вопросы квантовой теории, в частности некоторые проблемы теории многочастичных систем и квантовой теории поля. В книге просто и ясно описаны последние достижения квантовой механики. Все обсуждаемые вопросы нерелятивистской квантовой механики даны в рамках формализма вторичного квантования.

Книга будет полезна читателям, желающим ознакомиться с соответствующими проблемами без детального изучения математического формализма, а также читателям, желающим расширить и углубить свои знания в этой области.

*Редакция литературы по физике*

ИБ № 244

Г. ЛИПКИН

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Редактор *Е. М. Майкова*  
Художник *И. Д. Богачев*  
Художественный редактор *Л. Н. Наумов*  
Технический редактор *Ф. Х. Третьякова*  
Корректор *В. С. Соколов*

Слано в набор 24/III 1977 г. Подписано к печати 19/III 1977 г. Бумага тип. № 1  
60×90<sup>1/16</sup>=18,50 бум. л. 37 печ. л. 36,48. Изд. № 2/8844. Цена 2 р. 90 к.  
Зак. 0168

ИЗДАТЕЛЬСТВО «МИР»  
Москва, 1-й Рижский пер., 2

Ордена Трудового Красного Знамени Московская типография № 7 «Искра революции»  
Союзполиграфпрома при Государственном комитете Совета Министров СССР по делам  
издательств, полиграфии и книжной торговли.  
Москва, К-1, Трехпрудный пер., 9

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Предлагаемый вниманию читателей русский перевод книги Гарри Липкина «Квантовая механика», надеемся, заинтересует их.

В этой книге совершенно по-новому излагается квантово-механическая теория. Конечно, общие концепции квантовой механики достаточно устоялись, но описывать их можно, разумеется, по-разному и даже совсем необычно, как делается в данной книге, которая этим существенно отличается от известных учебников по квантовой механике.

Книгу Липкина можно назвать учебником, так как она возникла из прочитанных автором курсов лекций по квантовой механике. Она представляет собой исключительно оригинальное изложение нескольких избранных тем, характерных для современной квантовой теории.

Современность книги Липкина особенно ценна, так как большинство имеющихся в настоящее время курсов квантовой механики устарело. Они по плану и по стилю практически не отличаются от тех прекрасных первых книг, которые были написаны еще на заре квантовой механики;<sup>1</sup> в них обсуждается буквально одними и теми же словами очень ограниченное число задач об осцилляторе, ротаторе, атоме водорода, молекуле водорода и т. д.

Книга Липкина основывается на одной свежей идее. В ней излагаются все затрагиваемые вопросы нерелятивистской квантовой механики в рамках формализма вторичного квантования. Приступая к изучению новой квантовой системы, автор строит всякий раз свой, как он говорит, феноменологический, вторично-

квантованный гамильтониан, представленный через операторы рождения и уничтожения частиц и правильно учитывающий общие принципы симметрии и инвариантности. Далее он исследует его чисто алгебраическими методами или же с помощью теории возмущений в первом исчезающем порядке. Волновые функции в зависимости от пространственных координат при таком изложении практически не появляются; они нужны автору лишь для обозначения состояний в матричных элементах.

Автор не решает в книге ни одного дифференциального уравнения, хотя именно аналитическим изучением дифференциальных уравнений в основном фактически и заполнены обычные курсы квантовой механики, например старый курс Зоммерфельда <sup>1)</sup>).

Никогда не нужно забывать, что в количественном отношении квантовая механика развита очень слабо; действительно, как строгая количественная теория она представляет собой не более чем теорию атома водорода, гелия и нескольких других простейших систем. Высказываемые квантовой теорией претензии на всеобщую применимость пока, к сожалению, не подкреплены точными расчетами и убедительным сравнением с экспериментом даже для достаточно сложных атомов, не говоря уже о молекулах, твердых телах и ядрах. Впрочем, как качественная теория квантовая механика дает чрезвычайно много.

Конечно, квантовая теория доставила нам общую картину явлений природы, разработала очень плодотворный подход к их изучению и прежде всего ввела в физику новую концепцию комплексного векторного пространства состояний физической системы и матричных элементов перехода, определяющих вероятность различных физических процессов. Эти основные представления квантовой теории в соединении с принципами симметрии дают удивительно большое количество информации, как это особенно наглядно проиллюстрировано вслед за Дираком автором данной книги.

Книга Липкина по духу очень близка книге Дирака <sup>2)</sup>, но в отличие от последней в ней рассматриваются физические явления,

---

<sup>1)</sup> Зоммерфельд А., Волновая механика, М.—Л., 1933.

<sup>2)</sup> Дирак П. А. М., Принципы квантовой механики, М., 1960.

недавно открытые экспериментально и блестяще объясненные квантовой механикой: эффект Мессбауэра, элементарные возбуждения в ядрах и твердых телах, время жизни каонов, сверхпроводимость.

Особая ценность данной книги именно в том и состоит, что автор избегает в ней обсуждения физических явлений атомной и молекулярной спектроскопии, которыми полны стандартные учебники. Другая особенность книги Липкина заключается в использовании, как мы уже сказали выше, очень современных математических приемов, алгебраических по своему содержанию. Это прежде всего математический формализм вторичного квантования. Но, кроме него, автор подробно излагает в книге современные математические методы теории многих частиц и квантовой теории поля.

Специальная глава посвящена основам математической теории фейнмановских диаграмм и изложению математических методов современной теории возмущений. Оригинально изложена в книге теория симметрий, теория уравнения Дирака, математическая теория группы Лоренца и другие вопросы.

Очень часто изучение квантовой механики сводят к изучению математических свойств простых обыкновенных дифференциальных уравнений и некоторых классов специальных функций. При этом часто бывает и так, что изучающий именно это и считает квантовой теорией, а потому не получает практических навыков, позволяющих ему применять квантовомеханическую теорию к новым физическим явлениям. Несомненно, такого не случится с читателем, который прочтет книгу Липкина. Он приобретет необходимые знания, позволяющие ему активно пользоваться квантовомеханической теорией, к тому же сразу в рамках того математического формализма, который общепринят в современной научной литературе.

При переводе книги на русский язык имелись определенные трудности, связанные с тем, что о многом автор говорит бегло, вскользь, чтобы как можно ближе подвести читателя к переднему краю науки, как это обычно делает любой квалифицированный лектор; мы старались сохранить живой, разговорный язык автора и в русском переводе, не прибегая к отклонениям от текста английского издания, хотя это и стоило большого труда. Решено было

не снабжать книгу специальными примечаниями даже в тех местах, где у автора отсутствует последовательность изложения и он начинает пользоваться материалом, который еще не представлен (а иногда и вообще не будет дан), так как это нарушило бы стиль книги и потребовало бы довольно серьезной переработки английского текста.

Надеемся, что эту книгу с интересом встретят читатели, уже имеющие первое представление о квантовой механике. Для них абсолютно все будет ясно и понятно. При переводе книги на русский язык были исправлены мелкие ошибки и опечатки. Перевод гл. 1—7 выполнил Кривошеин А. А., а гл. 8—15 — Толмачёв В. В.

*В. В. Толмачёв*



*Эту книгу автор посвящает светлой памяти  
Амоса де-Шалита, который всегда стремился  
найти новые подходы ко всем задачам и  
воодушевлял других искать их.*

## ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

Данная книга была создана на основе лекционных записей курса квантовой механики повышенной сложности, который автор читал в США и Израиле в течение почти десяти лет для аспирантов первого года обучения. В этом курсе многие темы излагались совершенно иначе, чем в стандартных учебниках. Именно они и были включены в данную книгу, которую, как считает автор, нужно использовать в сочетании с каким-либо стандартным учебником, например учебником Мессиа «Квантовая механика»<sup>1)</sup>, чтобы иметь в руках полный курс квантовой механики, включающий как стандартный материал, так и новое изложение отдельных тем. Последние входят в данную книгу в форме нескольких самостоятельных «монографий для пешеходов»: по эффекту Мессбауэра, по многочастичной квантовой механике, по физике каонов, по теории рассеяния, по фейнмановским диаграммам и по релятивистской квантовой механике. Изложение перечисленных тем в данной книге, как надеется автор, будет полезным и активно работающим физикам, и студентам.

Главная и необычная особенность этой книги состоит в том, что в ней читатель знакомится с целым рядом интересных физических проблем и с сутью многих математических приемов намного раньше, чем в обычных учебниках квантовой механики, и, следовательно, может составить себе правильное представление о физическом содержании и основных приложениях квантовой механики еще до того, как обстоятельно овладеет ее формализмом. Студент получает в данной книге новые для него математические орудия в самом начале, и может использовать их при разборе последу-

---

<sup>1)</sup> *Messiah A.*, Quantum Mechanics, North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1961. (Готовится перевод в изд-ве «Наука».)

ющих задач. Для активно работающего физика «пешеходное» изложение многих вопросов будет доступно без обязательного «посещения школы» для изучения математического формализма.

Исторический подход к изложению материала в книге совсем не используется, потому что студенту часто легче понять более современные представления, чем ранние работы. Кроме того, надо учитывать, что теперешний студент знает много физических явлений, которые не были еще открыты на ранних этапах развития квантовой механики; например, он знает о существовании античастиц, о рождении пар, о том, как движутся частицы и дырки в твердых телах. Использование в квантовой проблеме многих частиц математических методов, заимствованных из теории поля, — хороший пример того, как математические приемы, первоначально развитые для крайне сложных и глубоких проблем, находят себе приложение в простых задачах. Эти математические методы описываются в данной книге с самого начала без ссылок на квантовую теорию поля, так что студент уже будет знаком с вторичным квантованием, когда приступит к изучению временной теории возмущений, и поэтому сразу сможет рассматривать процессы, в которых частицы испускаются и поглощаются. Такой подход намного упрощает вывод известного «золотого правила» Ферми. Студент, читающий эту книгу, уже будет знаком с концепцией частиц и дырок в теории многочастичных систем, когда приступит к изучению уравнения Дирака, т. е. он очень легко вводится в квантовую теорию поля с помощью полученной им информации о проблеме многих частиц.

Материал данной книги разбит по нескольким отдельным темам следующим образом.

Гл. 1 — небольшая монография на тему «Поляризованные фотоны в изложении для пешеходов». Она представляет собой введение в предмет квантовой механики и ее основные принципы; поводом для ее написания послужила первая глава знаменитой книги Дирака. На проблеме поляризованных фотонов можно проиллюстрировать основные концепции и математические приемы, используемые в квантовой механике, причем для этого требуется очень простая математика. Такое введение полезно для курса квантовой механики повышенной сложности, так как приступающие к ее изучению студенты имеют различный уровень подго-

товки и их надо подвести к какому-то одному уровню. Материал гл. 1, конечно, очень легко прочтет студент, обладающий необходимыми знаниями, а тот, кто имеет пробелы в своей подготовке, сможет восполнить их. Задачи, помещенные в конце главы, можно рассматривать как задачи «вступительного экзамена», позволяющие проверить, имеет ли читатель уровень подготовки, необходимый для дальнейшего чтения книги.

Гл. 2—4 составляют монографию «Передача импульса связанной системе и эффект Мессбауэра». Эти главы являются прекрасными примерами использования квантовой механики на практике. Гл. 2 и 3 при чтении курса можно излагать даже тогда, когда студент знает еще только минимум сведений из математического формализма квантовой механики. Для гл. 2 требуется знать основные свойства свободных частиц и одномерного гармонического осциллятора, а также уметь переходить от одного квантовомеханического базисного представления к другому. Для гл. 3 достаточно знать, что состояния систем, обладающих многими степенями свободы, описываются волновыми функциями; ничего другого из многочастичной квантовой механики знать не требуется. Этих простых сведений вполне достаточно, чтобы ввести читателя в курс дела и научить его, как практически пользоваться довольно сложными математическими приемами, например, как манипулировать с экспонентами, в показателях которых стоят гейзенберговские операторы. Для гл. 4 требуется знать вторичное квантование и временную теорию возмущений. Читатель, не знакомый с этими вопросами, должен перед изучением гл. 4 прочитать гл. 5—7. Более подготовленные читатели найдут в гл. 4 полностью законченную теорию передачи импульса связанным системам, которая применима к очень широкому кругу задач, обычно не рассматриваемых таким образом. Это — испускание, поглощение и рассеяние фотонов атомами и ядрами, ядерный  $\beta$ -распад и рассеяние электронов тяжелыми ядрами.

Гл. 5, 6, 9—11 образуют монографию «Квантовая механика многочастичных систем в изложении для пешеходов». В гл. 5 вводится формализм вторичного квантования таким образом, что читатель сначала хорошо осваивается с одночастичной квантовой механикой и лишь потом приступает к изучению квантовых систем, составленных из идентичных частиц. В гл. 6 формализм вторично-

го квантования используется в теории сложных (композитных) частиц. Показывается, что дейтрон является (правда, не в полном смысле) бозоном, и на очень элементарном математическом уровне иллюстрируется, что куперовские пары обладают именно такими свойствами, которые нужны для объяснения явлений сверхпроводимости и спаривающих корреляций в ядрах. В гл. 9—11 представлена более обстоятельная квантовая теория многочастичных систем также в изложении «для пешеходов» с обсуждением приближений Ферми — Томаса, Хартри — Фока, Бардина — Купера — Шриффера (БКШ) и приближения хаотических фаз, с приложениями в ядерной и атомной физике и физике твердого тела. Обсуждаются различные физические обоснования этих приближений; показывается, почему одно и то же приближение хаотических фаз можно использовать и в ядерной физике, и в физике твердого тела, хотя и по разным причинам. Излагается элегантный временной формализм, который очень легко можно понять в квантовой теории многих частиц и который позволяет читателю интуитивно почувствовать, как этот формализм применяется в квантовой теории поля.

Гл. 7 — это монография «Распад каонов в изложении для пешеходов». Перед тем как приступить к изучению этой главы, читатель должен обязательно прочесть все предыдущие главы, в особенности ознакомиться с основами формализма вторичного квантования по гл. 5. Временная теория возмущений излагается сначала в простом варианте по Гайтлеру, а затем сразу прилагается к процессам излучения, так как читатель уже знаком со вторичным квантованием. Далее эта теория возмущений излагается еще раз, но уже в современном варианте при объяснении разности масс каонов  $K_1$  и  $K_2$ . Многие основные концепции квантовой механики можно проиллюстрировать на примере простой системы  $K_1$  и  $K_2$ . Приведенное в гл. 7 обсуждение операций  $C$ ,  $P$  и  $T$  позволяет легко ввести читателя в теорию дискретных симметрий. Излагая теорию феноменологических гамильтонианов, мы показываем читателю, как много практически важных проблем можно атаковать с его помощью.

Гл. 8 — это монография «Теория рассеяния в изложении для пешеходов»; в ней проиллюстрированы многие важные моменты, с которыми приходится сталкиваться в квантовомеханических

задачах рассеяния и которые уже присутствуют в случае одномерных систем; последние можно обработать с помощью очень простой математики. «Одномерные полярные координаты» позволяют легко подвести читателя к теории парциальных волн и сдвигов фаз. Резонансы, связанные состояния, аналитические свойства амплитуды рассеяния, неупругое рассеяние и связь частиц и полей в квантовой теории поясняются на примере одномерного дельта-потенциала. Кроме того, в гл. 8 обсуждается теория возмущений, борновский ряд, функции Грина,  $S$ - и  $T$ -матрицы.

Отдельной темой в гл. 8 излагается теория одномерного периодического потенциала, причем используется метод сдвига фаз для вывода зонной структуры электронного спектра твердого тела. Этот вывод зонной структуры может оказаться полезным и в курсах физики твердого тела: он более простой и в то же время более общий, чем стандартные выводы.

Гл. 12 называется «Фейнмановские диаграммы в изложении для пешеходов»; в ней на элементарном уровне разъясняются различия между новым математическим формализмом теории возмущений и старой теорией возмущений с «промежуточными состояниями». В параграфе о «полево́й идеологии» показывается, как математические приемы и интуиция, приобретенные читателем при изучении многочастичной проблемы, можно использовать, чтобы получить определенное представление о проблемах, с которыми приходится сталкиваться в квантовой теории поля.

Гл. 13—15 составляют монографию «Принципы симметрии и инвариантности в релятивистской квантовой механике в изложении для пешеходов». В гл. 13 по-новому рассматривается уравнение Дирака на основе знаний, которые читатель получил в предшествующих главах при изучении проблемы многих частиц и несохранения четности. В гл. 14 и 15 обсуждаются симметрии и инвариантности с весьма элементарной точки зрения, разъясняется, как находить правильную физическую интерпретацию и применять те или иные математические приемы в различных ситуациях. В гл. 15 разбираются фундаментальные свойства группы Лоренца, которая служит частным случаем проявления зависящей от времени симметрии, при этом изложение основывается на общем подходе, развитом в книге автора «Группы Ли в изложении для пешеходов».

### *Благодарности*

Подход к квантовой механике, используемый в данной книге,— это результат моей 25-летней работы, сначала заключавшейся в изучении, а затем и в преподавании квантовой механики. Такой подход у меня сложился под влиянием очень большого числа людей, слишком многих, чтобы их можно было здесь упомянуть. За истекшие годы квантовая механика прошла через три периода своего развития: 1) период депрессии, 2) период пользы, 3) период воодушевления.

Я был аспирантом в Принстоне в первый, темный период как раз перед теми драматическими событиями, которые разыгрались в квантовой электродинамике. Квантовая механика выглядела теорией, пережившей период своей пользы. Все физические явления, которые можно было описать с ее помощью, были уже обсчитаны. Все явления, которые не были еще обсчитаны, приводили к бессмысленным расходимостям, когда к ним старались приложить квантовую механику. Общее настроение в Принстоне было таково, что все сознавали необходимость какого-то коренного пересмотра теории на фундаментальном уровне, чтобы эту «большую» теорию можно было хоть как-то «излечить». Ожидали, что возможно вскоре в физике произойдет такая же замечательная революция, какой сопровождалось появление теории относительности и самой квантовой механики в первой четверти двадцатого века. Книга Давида Бомы по квантовой механике, возникшая из его лекций (я имел удовольствие слушать их в Принстоне), дает прекрасное представление о превалировавшем в то время умонастроении с характерным упором на обстоятельное изучение глубинных вопросов квантовой теории для обнаружения основных причин появления тех трудностей и несуразностей, с которыми она столкнулась. Ставилась задача построения лучшей квантовой теории, а не задача дальнейшего изучения существующей квантовой механики и превращения ее в полезное орудие для различных приложений. Мое образование в Принстоне вдохновляло меня на борьбу с установившимися традициями в квантовой механике, на непрерывную постановку бесконечного множества вопросов в отношении того, что всеми было принято на веру, и в то же время оно стимулировало меня к поиску новых вообра-

жаемых и увлекательных подходов в квантовой теории, к прослеживанию выводов из всякого рода сумасшедших идей. Мне хотелось бы поблагодарить всех преподавателей факультета в Принстоне и всех моих сверстников-аспирантов за их активное участие в этой фазе моего образования. Имен слишком много, чтобы их можно было упоминать, и любая попытка сделать это неизменно привела бы к тому, что кто-нибудь все равно остался бы забытым.

Эра пользы квантовой механики началась в начале 50-х годов с разработки модели ядерных оболочек и модели коллективных колебаний в современной физике твердого тела, где квантовая механика стала широко использоваться в качестве основного орудия, причем совсем не требовалось решать глубокие проблемы, связанные с ультрафиолетовыми расходимостями. В это время я уже работал в институте им. Вейцмана и оказался под сильным влиянием школы израильских физиков с ее прагматическим стремлением использовать хотя бы сложную и высокую, но все же вполне земную теорию для описания нашего реального мира экспериментальных фактов. Очень хотелось бы поблагодарить моих друзей и коллег по институту в Реховоте, которые помогли мне осознать в этот период, что квантовая механика продолжает быть очень полезной и что многие с первого взгляда сложные и математически очень разработанные формальные теории на самом деле основаны на крайне простых физических представлениях.

Период воодушевления начался позже, когда исследователи на переднем крае физики открыли новые удивительные явления, которые оказалось возможным просто объяснить с помощью самой элементарной квантовой механики. Физика каонов, теория сверхпроводимости БКШ, эффект Мессбауэра — вот немногие примеры. Мне повезло провести год в Илинойсском университете в 1958—1959 гг. вскоре после появления знаменитой работы БКШ и первых экспериментов Мессбауэра, когда все еще продолжались оживленные дискуссии о том и о другом и вокруг можно было встретить много экспертов, от которых мне посчастливилось очень многое узнать. Когда я вернулся в США, в Урбану, еще на один год в 1962—1963 гг. и когда меня попросили прочесть вводный курс квантовой механики для аспирантов, у меня появилась мысль включить в него многое из этих волнующих достижений, ведь о них можно было рассказать на достаточно элементарном

уровне. Мне доставляет радость и удовольствие поблагодарить всех моих коллег и всех моих слушателей в Иллинойском университете, которые выучили меня многому из этих новых волнующих областей теоретической физики и которые постоянно воодушевляли и стимулировали меня, когда я преподавал квантовую механику. Я читал свой курс квантовой механики еще трижды в последующие годы в институте им. Вейцмана и составил в этот период большое количество конспектов и записей, которые привели в конце концов к созданию данной книги. Мне хотелось бы поблагодарить всех коллег по институту им. Вейцмана и всех аспирантов, слушавших мои курсы, помогавших мне с упражнениями в давших мне массу предложений об улучшении рукописи.

Особенно хочу поблагодарить Дж. Д. Джексона, который читал курс квантовой механики в Иллинойском университете за год до меня — в 1961—1962 гг., — за многие полезные советы и за обсуждения, а также Дж. Г. Д. Иенсена за то, что он разъяснил мне особую роль неполяризованного света, говорящую о его квантовой природе, Дж. Бардина за очень полезные замечания относительно моего переупрощенного изложения сверхпроводимости в гл. 6, И. Зарми и И. Фришмана за ценную критику моих лекционных записок и М. Д. Франка, который вдохновил меня на написание книги.

Наконец, я хочу поблагодарить всех очаровательных помощниц, которые научили меня пользоваться диктофоном, а также печатали бесчисленные страницы черновых лекционных записей, в частности Маргариту Ранкель, Еву Кинстель, Конни Картер, Илану Эйзен, Джорджетту Азог и Корину Хасдаи.

Очень жаль, что Амос де-Шалит, чья постоянная поддержка, стимулирование и критика были неоценимы для меня при преподавании курса и при подготовке книги, не дожид до того времени, когда смог бы увидеть все в законченном виде. Эту книгу я посвящаю его светлой памяти.

*Г. Липкин*



# *1. Поляризованные фотоны в изложении для пешеходов*

## *Введение*

Поляризованные фотоны использовал еще Дирак для иллюстрации основных принципов квантовой механики. В гл. 1 очень подробно обсуждается их теория, причем одновременно вводится много важных понятий квантовой механики, разъясняются отдельные квантовомеханические явления и парадоксы, и все это делается на уровне, на котором требуется знать только простую математику матриц размерности  $2 \times 2$ . Эту главу легко прочтет всякий, кто знаком с элементарными основами матричной алгебры и с дираковскими обозначениями для векторов пространства и матричных элементов.

Весь математический формализм, необходимый для квантовомеханического описания поляризованных фотонов, вводится естественно на классическом уровне: состояниям поляризации сопоставляются комплексные векторы в двумерном пространстве; приборы, которые предназначаются для измерения поляризации, характеризуются с помощью матриц, а результаты поляризационных экспериментов — средними значениями эрмитовых операторов, описывающих изменения поляризации фотона, производимые измерительным прибором; собственные векторы этих матриц описывают состояния частного вида, которые без каких-либо изменений могут проходить через измерительный прибор (например, состояния, поляризованные в направлении главных осей призмы Николя); наконец, унитарные преобразования вводятся для перехода от одного базиса к другому.

Неполяризованный и частично поляризованный свет иллюстрируют квантовую природу света уже на классическом уровне, поскольку такой свет описывать как непрерывные классические волны в пространстве нельзя, а можно только как дуги дискретных коротких импульсов или квантов при отсутствии какой-

либо корреляции между поляризациями последовательно распространяющихся импульсов. Для описания частично поляризованного света в двумерном векторном пространстве естественным образом вводится формализм матрицы плотности.

В § 5—9 гл. 1 показывается, как следует изменить классическое описание при учете квантовой природы электромагнитного излучения, т. е. того факта, что оно состоит из дискретных квантов. Основные особенности квантового описания выводятся из рассмотрения поведения одного отдельного фотона в различных экспериментальных ситуациях, описываемых сначала по классической теории, а потом с помощью квантового принципа соответствия, согласно которому квантовые эксперименты, произведенные над очень большим числом фотонов, можно описывать классически. Показывается, что результаты некоторых экспериментов не предсказуемы даже тогда, когда все о начальных условиях эксперимента нам известно. Это приводит к концепции статистического описания взаимодействия наблюдателя с системой, к представлению о несовместимости различных измерений и к более глубокому пониманию корпускулярно-волнового дуализма.

## Глава 1. ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ ФОТОНЫ И КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ

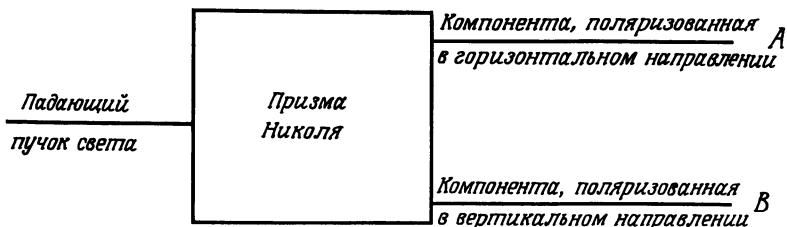
### § 1. Измерение поляризации классического пучка света

Обсудим, как производится измерение поляризации классического пучка света. Измерительным прибором может служить призма Николя, которая обладает способностью расщеплять пучок на две компоненты: поляризованную в горизонтальном направлении и поляризованную в вертикальном направлении, как это показано на фиг. 1.1. Относительные амплитуды компонент (поляризованной в горизонтальном направлении и поляризованной в вертикальном направлении) зависят от свойств падающего пучка. Изменяя интенсивности этих двух компонент, можно получить информацию о падающем пучке, но ее в общем случае недостаточно для определения его поляризации. Например, если интенсивности компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, окажутся *одинаковыми*, то это может означать, что падающий пучок имеет левую или правую круговые поляризации, либо линейные поляризации под углом  $\pm 45^\circ$  к горизонтали, либо любую из множества определенных эллиптических поляризаций. Чтобы полностью определить поляризацию падающего пучка, необходимо измерить не только относительные амплитуды компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, но также их относительные фазы.

Больше информации о падающем пучке можно получить из *двух* последовательных экспериментов (типа изображенного на фиг 1.1), производимых с различно ориентированными призмами Николя. Вторым эксперимент можно проводить, например, с призмой Николя, повернутой на  $45^\circ$  и разделяющей тем самым пучок на две линейно поляризованные компоненты с направлениями поляризации, составляющими углы  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$  с горизонталью. В рассмотренном выше примере, когда компоненты, поляризованные в горизонтальном и вертикальном направлениях, в первом эксперименте оказались равными, второй эксперимент позволяет сделать выбор между круговой поляризацией, линейной поляризацией в направлении под углом  $45^\circ$  с горизонталью и эллиптической поляризацией. Однако даже два рассматриваемых эксперимента не всегда позволяют полностью найти поляризацию падающего пучка. Все же остается неопределенность. Предположим, например, что интенсивности компонент, поляризованных в направле-

ниях под углами  $\pm 45^\circ$  к горизонтали, оказались равными, так же как и интенсивности компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях. Этим мы окончательно доказываем, что падающий пучок поляризован по кругу, но не можем различить, имеет ли он левую или правую круговую поляризацию.

Число экспериментов, необходимых для однозначного определения начальной поляризации, можно установить, рассуждая следующим образом. Пучок света полностью характеризуется величинами амплитуд и фаз обеих его компонент, т.е. значениями



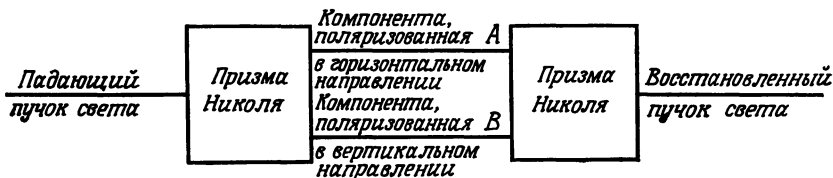
Фиг. 1.1.

четырёх параметров. Если мы не будем интересоваться абсолютными значениями интенсивностей и фазами компонент пучка, а только его поляризацией, то нам необходимо знать только два параметра: отношение амплитуд и разность фаз. Два эксперимента дают нам два условия, из которых мы можем определить значения этих двух параметров. Однако измеряются *интенсивности*, которые являются *квадратичными* функциями амплитуд, и поэтому они дают квадратные уравнения, а последние имеют по два решения. Наличие двух решений ведет к неопределенности, которая в приведенном выше примере и проявилась в невозможности различить правую и левую круговые поляризации.

Таким образом, в общем случае недостаточно одного эксперимента типа изображенного на фиг. 1.1, чтобы определить состояние поляризации падающего пучка. Если бы мы ограничились одним экспериментом, то не смогли бы в общем случае полностью определить поляризацию. С подобными ограничениями можно встретиться на практике, например когда пучок света состоит из кратковременных импульсов, слишком коротких для проведения двух последовательных измерений. Эту трудность, правда, можно преодолеть, расщепляя пучок света на две компоненты, скажем, с помощью полупрозрачного зеркала и проводя независимые измерения над каждой компонентой. Однако интенсивность импульса падающего света может оказаться столь малой, что при дальнейшем ее уменьшении (при расщеплении пучка) регистрирующий прибор не сможет ее точно измерить. В классической

физике эти трудности имеют чисто практический, а не принципиальный характер; их всегда можно преодолеть, усовершенствовав должным образом прибор. Поэтому в классической физике всегда можно однозначно измерить состояние поляризации падающего пучка. Мы увидим дальше, что в квантовой физике мы, как правило, вынуждены ограничиться только *одним* экспериментом для данного падающего пучка. Таким образом, вообще говоря, мы не в состоянии определить полностью его состояние поляризации.

Прибор, изображенный на фиг. 1.1, выполняет еще одну функцию. Он преобразует падающий пучок в два выходящих пучка и предписывает определенное состояние поляризации каждому



Фиг. 1.2.

из них. Из двух выходящих пучков один всегда поляризован в горизонтальном направлении, а другой — в вертикальном (независимо от состояния поляризации падающего пучка). Падающий пучок задает, конечно, отношение амплитуд обоих выходящих пучков. Состояния их поляризации полностью задаются измерительным прибором, т. е. определенной ориентацией призмы Николя. Если призму Николя повернуть на  $45^\circ$ , то два выходящих из нее пучка будут теперь линейно поляризованы в направлениях под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$  к горизонтали (независимо от состояния поляризации падающего пучка). И здесь снова падающий пучок определяет только отношение амплитуд получаемых компонент, а не их поляризацию, которая задается прибором. Это интересный пример взаимодействия измерительного прибора с системой, над которой проводится измерение. При взаимодействии с прибором исследуемая система преобразуется (вполне определенным образом для данного прибора).

В классической физике такое преобразование измеряемой системы полностью *обратимо*, и для нас оно несущественно. Можно, например, восстановить первоначальный падающий пучок из двух компонент, на которые он расщепился, как на фиг. 1.1, направляя их с помощью соответствующей оптической системы на другую призму Николя, соединяющую обе компоненты обратно в один пучок, как показано на фиг. 1.2. Если в пространстве между двумя призмами Николя не производится измерений, то система пред-

ставляет собой просто «черный ящик», в который входит данный падающий пучок и из которого выходит в точности такой же пучок. Интенсивности каждой компоненты падающего пучка можно измерить, когда они разделены в пространстве между двумя призмами Николя. Таким образом, в классической физике всю информацию о падающем пучке можно получить с помощью прибора, из которого падающий пучок выходит без каких бы то ни было изменений. На практике, однако, измерение интенсивности какой-либо компоненты в пространстве между призмами Николя (фиг. 1.2) требует изъятия небольшого количества энергии от каждой компоненты для создания регистрируемого сигнала в измерительном устройстве. Если падающий пучок очень слабый, то эти затраты энергии могут изменить отношение амплитуд и разность фаз компонент настолько, что пучок, выходящий из второй призмы Николя, будет очень сильно отличаться от падающего пучка. Следовательно, невозможно будет измерить интенсивности компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, не изменяя существенным образом падающего пучка. В классической физике подобные ограничения относят исключительно к несовершенству прибора. Считается, что в принципе всегда можно подобрать лучший и более чувствительный прибор, такой, что проводимые с его помощью измерения интенсивности компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, не повлияют заметным образом на пучок. *В квантовой физике, напротив, существует предел чувствительности подобных измерений.* Измерение интенсивности любой из компонент оказывает столь сильное возмущающее воздействие на пучок, что восстановить после измерения падающий пучок уже оказывается невозможно.

Многое из сказанного выше не применимо к некоторым специальным случаям. Это те случаи, когда для полного определения состояния поляризации падающего пучка достаточно произвести один эксперимент и когда поляризация падающего пучка не меняется при прохождении его через прибор. Для эксперимента, изображенного на фиг. 1.1, это случай, когда падающий пучок либо полностью поляризован в горизонтальном направлении, либо полностью поляризован в вертикальном направлении. При этом в одном из направлений *A* или *B* наблюдается полная интенсивность, а в другом — нулевая. Теперь точное состояние поляризации падающего пучка устанавливается при помощи одного измерения, и поляризация выходящего пучка будет в точности такой же, как поляризация падающего. Но если призму Николя повернуть на  $45^\circ$ , то для падающих пучков, линейно поляризованных в вертикальном или горизонтальном направлениях, такого положения больше не будет. Через призму Николя без изменения будут проходить пучки, линейно поляризованные в направлениях

под углом  $\pm 45^\circ$  к горизонтали; они будут давать полную интенсивность в одном направлении и нулевую в другом, и одного единственного эксперимента будет достаточно для определения состояния поляризации падающего пучка. При любой ориентации призмы Николя всегда существуют для падающего пучка два таких состояния поляризации, которые удовлетворяют указанным выше условиям. Эти два состояния можно назвать «собственными состояниями» того преобразования падающего пучка, которое совершается призмой Николя.

## § 2. Матричное описание поляризации света

Электрический вектор пучка поляризованного света, распространяющегося по направлению оси  $z$ , можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= E_x e^{i(\omega t + \phi_x)} \mathbf{e}_x + E_y e^{i(\omega t + \phi_y)} \mathbf{e}_y = \\ &= e^{i\omega t} (E_x e^{i\phi_x} \mathbf{e}_x + E_y e^{i\phi_y} \mathbf{e}_y), \end{aligned} \quad (1.1)$$

где  $\mathbf{e}_x$  и  $\mathbf{e}_y$  — единичные векторы в направлении осей  $x$  и  $y$  соответственно. Это выражение удобно представить в компактной форме в виде вектора, или матрицы-столбца, с комплексными компонентами

$$\xi = \begin{pmatrix} E_x e^{i\phi_x} \\ E_y e^{i\phi_y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Здесь  $E_1$  и  $E_2$  — комплексные числа, равные  $E_x e^{i\phi_x}$  и  $E_y e^{i\phi_y}$ . Направим ось  $x$  горизонтально, а ось  $y$  вертикально. В наших обозначениях пучок, имеющий амплитуду  $E$  и поляризованный вертикально (т. е. вдоль оси  $y$ ), описывается вектором

$$\xi_v = \begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Существуют два взаимно перпендикулярных направления поляризации, составляющие угол  $45^\circ$  с горизонталью. Если компоненты  $E_x$  и  $E_y$  равны по величине и *совпадают* по фазе, то угол поляризации пучка мы будем считать равным  $+45^\circ$ ; если же компоненты  $E_x$  и  $E_y$  равны по величине и *противоположны* по фазе, то угол поляризации пучка мы будем считать равным  $-45^\circ$ .

С помощью введенных нами векторов, или матриц-столбцов, легко описать эксперимент, показанный на фиг. 1.1. Пусть состояние падающего пучка задается вектором  $\xi$ , определенным (1.2).

Тогда два пучка, которые на фиг. 1.1 выходят из призмы по направлениям  $A$  и  $B$ , описываются соответственно векторами

$$\xi_A = \begin{pmatrix} E_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.4a)$$

$$\xi_B = \begin{pmatrix} 0 \\ E_2 \end{pmatrix}. \quad (1.4b)$$

Эти векторы связаны с вектором, представляющим падающий пучок, следующими матричными соотношениями:

$$\xi_A = A\xi, \quad (1.5a)$$

$$\xi_B = B\xi, \quad (1.5b)$$

где

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.6a)$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.6b)$$

Интенсивности пучков, идущих по направлениям  $A$  и  $B$ , равны нормам векторов  $\xi_A$  и  $\xi_B$ . Действительно, из (1.4) получаем

$$I_A = (\xi_A, \xi_A) = |E_1|^2, \quad (1.7a)$$

$$I_B = (\xi_B, \xi_B) = |E_2|^2, \quad (1.7b)$$

как мы и сказали. Интенсивности можно выразить также и через вектор  $\xi$ , задающий падающий пучок, и операторы  $A$  и  $B$ , характеризующие свойства прибора. Операторы  $A$  и  $B$  эрмитовы и являются проекционными операторами, т. е.

$$A^\dagger = A = A^2, \quad (1.8a)$$

$$B^\dagger = B = B^2. \quad (1.8b)$$

Отсюда получаем

$$I_A = (\xi_A, \xi_A) = (A\xi, A\xi) = (\xi, A^2\xi) = (\xi | A | \xi), \quad (1.9a)$$

$$I_B = (\xi_B, \xi_B) = (B\xi, B\xi) = (\xi, B^2\xi) = (\xi | B | \xi). \quad (1.9b)$$



Разность интенсивностей пучков, идущих по направлениям  $A$  и  $B$ , находится по формуле

$$\Delta I = I_A - I_B = (\xi | A - B | \xi) = (\xi | M | \xi), \quad (1.10)$$

где матрица  $M$  определяется равенством

$$M = A - B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Таким образом, результаты измерений интенсивностей просто записываются через «диагональные матричные элементы» или «математические ожидания» эрмитовых операторов  $A$ ,  $B$  и  $M$  в начальном состоянии  $\xi$ . Мы также видим, что интенсивности, даваемые формулами (1.7), зависят только от амплитуд компонент  $E_1$  и  $E_2$  и, следовательно, не дают информации об их разности фаз.

В предыдущем параграфе мы видели, что если падающий пучок полностью поляризован в вертикальном или горизонтальном направлении, то он проходит через призму Николя без изменения и для получения полной информации о нем достаточно провести одно измерение интенсивности. Такая ситуация очень просто описывается при помощи матриц. Если падающий пучок полностью поляризован в горизонтальном направлении, то  $E_2 = 0$ ,  $\xi_A = \xi$  и  $\xi_B = 0$ . Вектор состояния падающего пучка  $\xi$  является собственным вектором матриц  $A$ ,  $B$  и  $M$ , описывающих то преобразование падающего пучка, которое совершает над ним измерительный прибор. Если вектор, описывающий падающий пучок, является собственным вектором этих матриц, то они не изменяют вид этого вектора, а только умножают его на некоторую константу, т. е. не изменяют состояния поляризации пучка, хотя и могут изменить его интенсивность. Для падающего пучка, полностью поляризованного в вертикальном направлении, ситуация аналогична:  $E_1 = 0$ ,  $\xi_A = 0$ ,  $\xi_B = \xi$ , причем  $\xi$  тоже будет собственным вектором матриц  $A$ ,  $B$  и  $M$ .

### § 3. Преобразование матриц

Посмотрим теперь, как с помощью матриц можно описать эксперимент с призмой Николя (фиг. 1.1), повернутой на угол  $45^\circ$ , когда компонента, поляризованная под углом  $+45^\circ$ , идет в направлении  $A$ , а компонента, поляризованная под углом  $-45^\circ$ , — в направлении  $B$ . Пучки, имеющие амплитуду  $E$  и поляризованные под

углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ , описываются соответственно векторами

$$\xi_{+45^\circ} = \begin{pmatrix} E/\sqrt{2} \\ E/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (1.12a)$$

$$\xi_{-45^\circ} = \begin{pmatrix} E/\sqrt{2} \\ -E/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (1.12b)$$

Пусть падающий пучок описывается вектором  $\xi$  [см. (1.2)]; тогда пучки, идущие в направлениях  $A$  и  $B$ , будут описываться векторами

$$\xi'_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \\ \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \end{pmatrix}, \quad (1.13a)$$

$$\xi'_B = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(E_1 - E_2) \\ -\frac{1}{2}(E_1 - E_2) \end{pmatrix}. \quad (1.13b)$$

Здесь штрихи введены, чтобы не спутать эти векторы и ранее рассматриваемые векторы (1.4). Соответствующие интенсивности оказываются равными квадратам данных векторов, т. е.

$$I'_A = (\xi'_A, \xi'_A) = \frac{1}{2} |E_1 + E_2|^2, \quad (1.14a)$$

$$I'_B = (\xi'_B, \xi'_B) = \frac{1}{2} |E_1 - E_2|^2. \quad (1.14b)$$

Формулы, аналогичные (1.5), (1.9) и (1.10), сразу получаются, если ввести матрицы

$$A' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (1.15a)$$

$$B' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (1.15b)$$

$$M' = A' - B' = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.15в)$$

Тогда будем иметь

$$\xi'_A = A'\xi, \quad (1.16а)$$

$$\xi'_B = B'\xi, \quad (1.16б)$$

$$I'_A = (\xi | A' | \xi), \quad (1.17а)$$

$$I'_B = (\xi | B' | \xi), \quad (1.17б)$$

$$I'_A - I'_B = (\xi | M' | \xi). \quad (1.17в)$$

Как и матрицы  $A$ ,  $B$ ,  $M$ , матрицы  $A'$ ,  $B'$  и  $M'$  эрмитовы, а матрицы  $A'$  и  $B'$  задают проекционные операторы, хотя в отличие от соответствующих более простых матриц  $A$ ,  $B$  и  $M$  ни одна из этих трех матриц  $A'$ ,  $B'$  и  $M'$  не диагональна. Введенные в (1.12) векторы, описывающие пучки, линейно поляризованные под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ , являются собственными векторами матриц  $A'$ ,  $B'$  и  $M'$ . Это согласуется с тем экспериментальным фактом, что пучки, поляризованные под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ , проходят через наш прибор без каких-либо изменений, и поэтому для полного определения состояния поляризации каждого такого пучка достаточно только одного эксперимента.

Более простое описание рассматриваемого здесь эксперимента с повернутой на  $45^\circ$  призмой Николь можно получить, если взять в качестве базисных не векторы, соответствующие пучкам, поляризованным в горизонтальном и вертикальном направлениях, а векторы, описывающие пучки, поляризованные под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ . В таком базисе пучки, имеющие амплитуду  $E$  и поляризованные под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ , описываются соответственно векторами

$$\xi''_{+45^\circ} = \begin{pmatrix} E \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.18а)$$

$$\xi''_{-45^\circ} = \begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}. \quad (1.18б)$$

Пусть в нашем новом базисе падающий пучок описывается вектором

$$\xi'' = \begin{pmatrix} E''_1 \\ E''_2 \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Тогда  $E''_1$  будет компонентой падающего пучка, поляризованной под углом  $+45^\circ$ , а  $E''_2$  — компонентой, поляризованной под углом

—45°. В данном представлении пучки, наблюдаемые в направлениях  $A$  и  $B$ , описываются векторами

$$\xi_A'' = \begin{pmatrix} E_1'' \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.20a)$$

$$\xi_B'' = \begin{pmatrix} 0 \\ E_2'' \end{pmatrix}, \quad (1.20b)$$

а их интенсивности даются следующими формулами:

$$I_A'' = (\xi_A'', \xi_A'') = |E_1''|^2, \quad (1.21a)$$

$$I_B'' = (\xi_B'', \xi_B'') = |E_2''|^2. \quad (1.21b)$$

Матрицы  $A'$ ,  $B'$  и  $M'$  в рассматриваемом представлении принимают следующий вид:

$$A'' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.22a)$$

$$B'' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.22b)$$

$$M'' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.22в)$$

Формулы (1.18), (1.20) — (1.22) по виду значительно отличаются от соответствующих формул (1.12) — (1.15), описывающих тот же самый эксперимент в другой системе базисных векторов. Однако формулы (1.19) — (1.22) в точности такие же по виду, как формулы (1.2), (1.4), (1.6), (1.7) и (1.11), описывающие эксперимент с призмой Николя, поляризующей в вертикальном и горизонтальном направлениях, но в другой системе базисных векторов. То, что два различных эксперимента формально описываются одинаково, не так удивительно, как это может показаться, ибо эти разные эксперименты, по сути дела, не отличаются друг от друга. Они различаются только поворотом прибора на угол 45° относительно выбранных координатных осей  $x$  и  $y$ . Если мы повернем оси координат вместе с прибором, то второй эксперимент в повернутой системе координат будет в точности таким же, как первый эксперимент в неповернутой системе. При втором описании второго эксперимента мы используем базисные векторы, повернутые под углами +45° и -45°, что соответствует повороту системы координат вместе с прибором и приводит поэтому к описанию, формально в точности совпадающему с описанием первого эксперимента в неповернутой системе координат.

Два кажущихся различными описания второго эксперимента переходят одно в другое при повороте осей координат на  $45^\circ$ . Такое преобразование от одной системы базисных векторов к другой должно выражаться при помощи унитарного преобразования векторов и матриц:

$$K'' = UK'U^\dagger, \quad (1.23a)$$

$$\xi'' = U\xi', \quad (1.23b)$$

где  $K$  означает любую из матриц  $A$ ,  $B$  или  $M$ , а  $\xi$  — произвольный вектор. Унитарную матрицу  $U$ , описывающую это преобразование, найти довольно просто. Она в точности совпадает с ортогональной матрицей поворота на угол  $45^\circ$ :

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos 45^\circ & \sin 45^\circ \\ -\sin 45^\circ & \cos 45^\circ \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

Подставляя выражение (1.24) для матрицы  $U$  в (1.23a), мы действительно убеждаемся, что с помощью матрицы (1.24) осуществляется указанное преобразование матриц  $A'$ ,  $B'$  и  $M'$ . Подставляя (1.24) в (1.23b), можно выразить  $E_1''$  и  $E_2''$  через соответствующие им величины  $E_1$  и  $E_2$ :

$$E_1'' = \frac{E_1 + E_2}{\sqrt{2}}, \quad (1.25a)$$

$$E_2'' = \frac{E_1 - E_2}{\sqrt{2}}. \quad (1.25b)$$

Используя формулы (1.25), легко видеть, что интенсивности пучков в направлениях  $A$  и  $B$  при обоих наших описаниях [см. (1.14) и (1.21)] одинаковы, хотя формулы в обоих случаях кажутся совершенно не похожими. Это вообще характерно для любых двух описаний одного и того же физического эксперимента в разных базисах или системах координат. Числовые значения компонент вектора или матрицы в разных системах координат (задающих их в разных базисах) могут, вообще говоря, сильно различаться. Однако числовые величины, представляющие собой результаты физических измерений, должны быть одними и теми же при использовании любой системы координат.

Интересно теперь более детально изучить матрицу  $U$ . В силу унитарности этой матрицы она имеет собственные векторы и соб-

ственные значения, по модулю равные единице. Собственные векторы матрицы  $U$  следующие:

$$U' = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (1.26a)$$

$$U'' = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ i \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (1.26b)$$

Соответствующие собственные значения равны

$$(1+i)/\sqrt{2} = e^{i\pi/4} \quad \text{и} \quad (1-i)/\sqrt{2} = e^{-i\pi/4}.$$

Они по модулю действительно равны единице. Собственные векторы (1.26) соответствуют таким состояниям поляризации, которые не изменяются при преобразовании (1.24), т. е. при повороте на  $45^\circ$ . Из вида собственных векторов (1.26) непосредственно следует, что они описывают два состояния круговой поляризации. После поворота на  $45^\circ$  оба эти состояния, поляризованные по кругу, остаются поляризованными по кругу и сохраняют начальное направление круговой поляризации. Единственное изменение, вызываемое таким преобразованием, сводится к появлению фазового множителя с аргументом  $+\pi/4$  или  $-\pi/4$  в зависимости от направления круговой поляризации. Эти фазовые множители  $e^{i\pi/4}$  и  $e^{-i\pi/4}$  как раз и есть собственные значения, равные по модулю единице.

#### § 4. Неполяризованный и частично поляризованный свет

Что представляет собой неполяризованный свет? Солнечный свет неполяризован. Если солнечный свет пропустить через прибор, изображенный на фиг. 1.1, то на выходе из прибора половина его будет поляризована в горизонтальном направлении, а половина — в вертикальном. Если призму Николя повернуть на  $45^\circ$ , то на выходе половина света будет поляризована под углом  $+45^\circ$ , а половина — под углом  $-45^\circ$ . При повороте призмы Николя на любой угол пучок всегда будет расщепляться на две равные компоненты. Во всех этих экспериментах пучок ведет себя совершенно так же, как пучок, поляризованный по кругу, который расщепляется призмой Николя на две одинаковые компоненты (независимо от ориентации призмы). Но если неполяризованный солнечный пучок пропустить через пластинку в четверть волны,

которая свет, поляризованный по кругу, преобразует в линейно поляризованный, то неполяризованный свет *останется неполяризованным*. Неполяризованный свет — это смесь компонент одинаковой интенсивности, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, между которыми, однако, *нет постоянной разности фаз*.

Неполяризованный свет нельзя описать вектором (1.1) или матрицей-столбцом (1.2). Такое описание всегда предполагает наличие постоянной разности фаз между компонентами, поляризованными в вертикальном и горизонтальном направлениях. *Существование неполяризованного света указывает на квантовую природу света*. Неполяризованный свет невозможно описать простой классической монохроматической волной вида (1.1) или какой-либо линейной комбинацией таких волн. Неполяризованный свет можно описать классически только как серию, или цуг, очень частых и очень коротких вспышек (или импульсов) света, каждая из которых имеет свою собственную поляризацию, причем поляризации отдельных импульсов никак не коррелированы между собой. Если световые импульсы и интервалы между ними очень коротки по сравнению с характерными рабочими временами измерительного прибора, то их совокупность будет регистрироваться как непрерывный поток света и любое измерение поляризации, произведенное при помощи этого прибора, даст поляризацию, которая будет средней по поляризациям отдельных импульсов.

Кроме неполяризованных пучков, существуют «частично поляризованные пучки». Предположим, что некоторый неполяризованный пучок мы пропустили через прибор, аналогичный по устройству изображенному на фиг. 1.2, и пусть, скажем, половина компоненты, поляризованной в вертикальном направлении, поглотилась в пространстве между двумя призмами Николя. Тогда в восстановленном пучке интенсивность компоненты, поляризованной в вертикальном направлении, будет вдвое меньше, чем компоненты, поляризованной в горизонтальном направлении, и между компонентами *не будет определенного соотношения фаз*. Полученный пучок можно рассматривать как смесь пучка, поляризованного в горизонтальном направлении, и неполяризованного пучка. Такой пучок называется *частично поляризованным*.

Остановимся теперь на матричном описании неполяризованных и частично поляризованных пучков. Возьмем, например, пучок, состоящий из коротких импульсов,  $1/3$  которых поляризована в горизонтальном направлении,  $1/3$  — под углом  $+45^\circ$  и  $1/3$  — под углом  $-45^\circ$ . Если полная интенсивность этого пучка равна  $E$ , то три его компоненты описываются векторами

$$\xi^{(1)} = \begin{pmatrix} E/\sqrt{3} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi^{(2)} = \begin{pmatrix} E/\sqrt{6} \\ E/\sqrt{6} \end{pmatrix}, \quad \xi^{(3)} = \begin{pmatrix} E/\sqrt{6} \\ -E/\sqrt{6} \end{pmatrix}, \quad (1.27)$$

причем эти три вектора нельзя представить одним вектором, так как компоненты *некогерентны*. Векторы (1.27) — световые импульсы, которые существуют в *разные моменты времени*; они не могут интерферировать друг с другом.

Результаты любого эксперимента с рассматриваемым пучком можно предсказать, используя наше матричное описание и вычисляя интенсивности каждой из трех компонент и затем складывая их. Таким образом, разность интенсивностей, наблюдаемых по направлениям  $A$  и  $B$  в приборе, изображенном на фиг. 1.1, определяется, согласно формуле (1.10), выражением

$$I = I_A - I_B = (\xi^{(1)} | M | \xi^{(1)}) + (\xi^{(2)} | M | \xi^{(2)}) + (\xi^{(3)} | M | \xi^{(3)}) = \sum_{\alpha=1}^3 (\xi^{(\alpha)} | M | \xi^{(\alpha)}). \quad (1.28)$$

Если пучок состоит из многих некогерентных компонент, то этот способ описания становится очень громоздким. *Более удобно описывать частично поляризованный пучок не вектором, а некоторой матрицей.*

Перепишем формулу (1.28) по-другому, пользуясь явно матричными индексами:

$$I = \sum_{\alpha} \sum_{i,j} \xi_i^{(\alpha)*} M_{ij} \xi_j^{(\alpha)}. \quad (1.29)$$

Эту формулу можно упростить, если ввести в рассмотрение матрицу

$$\rho_{ji} = \sum_{\alpha} \xi_j^{(\alpha)} \xi_i^{(\alpha)*}. \quad (1.30a)$$

Тогда получим

$$I = \sum_{i,j} M_{ij} \rho_{ji} = \text{Sp}(M\rho). \quad (1.30b)$$

Матрица  $\rho_{ji}$  называется «матрицей плотности».

Из формулы (1.30b) видно, что четыре элемента матрицы плотности содержат достаточно информации о падающем пучке и позволяют предсказать численный результат эксперимента, изображенного на фиг. 1.1. Аналогично для любого эксперимента, результат которого можно выразить средним значением некоторой матрицы, подобной (1.10) (например в случае эксперимента с частично поляризованным пучком), данный результат представляется формулой (1.30b), т. е. шпуром от произведения матрицы плотности и матрицы, описывающей измерительный прибор.

Из формулы (1.30b) видно, что матрица плотности содержит всю нужную информацию о неполяризованном или частично поляризованном пучке, необходимую для описания результатов



всех таких измерений интенсивностей, при которых суммируются вклады от всех импульсов в пучке, а не обследуются отдельные импульсы. Матрица плотности является, таким образом, обобщением векторного описания (1.2): с ее помощью можно описать пучок, который может быть как «некогерентной смесью» нескольких компонент, так и «чистым состоянием» с определенной поляризацией.

Всякий неполяризованный пучок можно рассматривать как составленный наполовину из компоненты, поляризованной в вертикальном направлении, и наполовину из компоненты, поляризованной в горизонтальном направлении; матрица плотности для него пропорциональна единичной матрице:

$$\rho_{\text{неполяр}} = \frac{1}{2} E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.31)$$

Любой неполяризованный пучок можно также рассматривать как составленный наполовину из компоненты, поляризованной под углом  $+45^\circ$ , и наполовину из компоненты, поляризованной под углом  $-45^\circ$ , или как смесь 1 : 1 любых двух других компонент, описываемых двумя ортогональными векторами. Из определения матрицы плотности (1.30а) непосредственно видно, что во всех этих случаях получается одна и та же формула (1.31).

Полная интенсивность пучка дается шпуром матрицы плотности, т. е.

$$I = \text{Sp } \rho. \quad (1.32)$$

## § 5. Введение квантов

Мы знаем, что электромагнитное излучение нельзя до бесконечности дробить на пучки все меньшей и меньшей интенсивности. Наименьшей возможной единицей излучения является квант света, имеющий энергию  $E = h\nu$ , где  $h$  — постоянная Планка, а  $\nu$  — частота. Эти кванты, или фотоны, неделимы, и любое устройство, предназначенное для измерений интенсивности пучка на самом деле регистрирует только целое число квантов.

Что произойдет, если вместо падающего пучка на прибор, изображенный на фиг. 1.1, направить один фотон? Этот фотон нельзя расщепить так, чтобы одна его часть вышла из призмы Николая по направлению  $A$ , а другая — по направлению  $B$ . Фотон неделим, и если он вообще выйдет из прибора, то он должен выйти либо по направлению  $A$ , либо по направлению  $B$ . Далее, если на прибор направить классический пучок, поляризованный под углом  $45^\circ$ , то по направлению  $A$  из прибора выйдет его компонента с половиной интенсивностью, поляризованная горизонтально, а по направлению  $B$  выйдет другая компонента (также

с половинной интенсивностью) поляризованная вертикально. Чтобы единым образом описывать свет, включая в рассмотрение как классические пучки (состоящие из многих фотонов), так и единичные фотоны, мы должны найти способ, позволяющий примирить результаты классических экспериментов с неделимостью фотонов.

В классическом эксперименте используется пучок, состоящий из очень большого числа фотонов, так что его квантовая структура не проявляется. Если этот пучок полностью поляризован под углом  $45^\circ$ , то и все фотоны в нем должны быть поляризованы под углом  $45^\circ$ . Классический эксперимент говорит нам, что половина падающих фотонов выходит из прибора по направлению  $A$  и горизонтально поляризована, а другая половина фотонов выходит по направлению  $B$  и вертикально поляризована. Мы можем получить единое и непротиворечивое описание одновременно как однофотонной, так и многофотонной ситуаций, если только будем утверждать, что *отдельный фотон может с равной вероятностью выйти по направлению  $A$  или по направлению  $B$* . Таким образом, мы не можем предсказать, по какому пути пойдет данный единичный фотон. Но если падает много фотонов, то мы можем сказать, что в среднем половина из них выйдет по направлению  $A$ , а половина — по направлению  $B$ .

Это вероятностное, или статистическое, описание физических явлений означает определенный отход от положений классической физики. В классической физике, если мы располагаем всей возможной информацией о состоянии данной системы в определенный момент времени, то, используя уравнения движения, можем точно предсказать ее поведение в будущем.

В разбираемом выше примере нам дана система, о которой в начальный момент времени мы знаем все. Имеется единичный фотон, поляризованный под углом  $45^\circ$  к горизонтали, падающий на призму Николя. Однако мы абсолютно никак не можем предсказать, выйдет ли он по направлению  $A$  или по направлению  $B$ .

Статистическую природу этого описания можно лучше понять, если обратиться к какому-либо совершенно случайному событию, такому, как подбрасывание монеты. Если монета симметрична и нет никаких изменений в способе подбрасывания, то следует ожидать, что в среднем число «орлов» равно числу «решек». Вместе с тем мы никак не можем предсказать результат отдельного подбрасывания монеты. Если монета подбрасывается большое число раз, то число «орлов» будет приблизительно равно числу «решек» и разница между ними, возникающая из-за случайных флуктуаций, по порядку величины равна корню квадратному из общего числа подбрасываний монеты. Таким образом, относительная флуктуация уменьшается с увеличением числа подбрасываний. Если монету подбросить миллион раз, то случайные флуктуации по порядку величины будут составлять 0,1%. Эксперимент с фото-

ном напоминает эксперимент с монетой. Если на призму Николя падает очень большое число фотонов, поляризованных под углом  $45^\circ$ , то число фотонов, наблюдаемых в направлении  $A$ , будет приблизительно равно числу фотонов, наблюдаемых в направлении  $B$ , со статистическим отклонением порядка корня квадратного из общего числа фотонов.

Имеется, однако, весьма существенное различие между явлением с подбрасыванием монеты и экспериментом с фотоном. Монета — макроскопический объект, подвластный законам классической физики. Предположим, что мы знаем точно начальное положение и ориентацию монеты, силы, действующие на нее в момент подбрасывания, упругие постоянные и коэффициенты трения для монеты и для поверхности, на которую она падает. Тогда мы сможем в принципе предсказать каждый раз, упадет ли она «орлом» или «решкой». Если мы всего этого не знаем, то должны довольствоваться лишь статистическим описанием (исключительно по причине нашей неосведомленности). Мы не знаем всего того, что могли бы в принципе знать о монете.

Можно спросить: а не применимо ли все сказанное к фотону? Конечно, он, быть может, гораздо сложнее устроен, чем мы думаем, т. е. имеет очень сложную структуру, имеет такие степени свободы, о которых мы пока совершенно не помышляем. Если бы мы знали все об этой «субструктуре» и знали бы численные значения всех соответствующих «скрытых параметров», то смогли бы предсказать, как будет проходить через призму Николя каждый отдельный фотон и каким образом он выйдет — по направлению  $A$  или по направлению  $B$ . *Квантовая теория дает отрицательный ответ на этот вопрос. Она утверждает, что наша неспособность предсказать, по какому из двух направлений  $A$  или  $B$  пойдет фотон, отражает фундаментальное свойство природы.*

Пока что нет никаких экспериментальных подтверждений наличия в природе скрытых параметров, и поэтому мы будем предполагать, что их вообще не существует<sup>1)</sup>. Кроме того, надо счи-

<sup>1)</sup> Построить строгое доказательство, что скрытых параметров не существует, разумеется, нельзя. Паули однажды заметил, что «скрытые параметры — как москиты: чем больше их убиваешь, тем больше их появляется». В последние десятилетия были опубликованы работы, авторы которых пытаются решать задачи квантовой механики, вводя в рассмотрение скрытые параметры. Была даже предложена формулировка квантовой механики, использующая скрытые параметры; в ней были получены все результаты квантовой теории, включая и результат разобранного нами примера о невозможности предсказать, выйдет ли фотон в направлении  $A$  или в направлении  $B$ . Результат, конечно, полностью определяется значениями скрытых параметров, знать которые невозможно из-за наличия взаимодействия наблюдателя с измерительным прибором. Так как квантовая теория в общепринятой формулировке получает все эти результаты без использования скрытых параметров, мы их в дальнейшем рассматривать не будем.

таться с тем фактом, что квантовая теория, опирающаяся на подобную непредсказуемость достигла больших успехов в описании многих явлений природы.

Матричный формализм, развитый нами выше при рассмотрении классических экспериментов, очень многое дает также и при обсуждении квантовомеханического эксперимента. Пусть теперь вектор  $\xi$  [см. формулу (1.2)] описывает состояние поляризации отдельного фотона:

$$\xi = \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

и пусть этот вектор  $\xi$  для единичного фотона нормирован на единицу:

$$|E_1|^2 + |E_2|^2 = 1. \quad (1.33)$$

Результаты классических измерений интенсивностей по направлениям  $A$  и  $B$  [см. формулы (1.7), (1.9) и (1.10)] можно теперь интерпретировать просто как дающие *средние* числа фотонов, наблюдаемых в направлениях  $A$  и  $B$ , и *среднее* значение разности между этими числами. Если имеется только один фотон, то среднее число фотонов, появляющихся в любом направлении  $A$  или  $B$ , должно быть меньше или равно единице, и поэтому это «среднее число» есть просто *вероятность* появления фотона в данном направлении.

Таким образом, для квантового эксперимента диагональные матричные элементы, или средние значения эрмитовых операторов  $A$ ,  $B$  и  $M$ , вычисленные для начального вектора  $\xi$ , дают средние значения результатов экспериментов с одним фотоном, т. е. средние значения из чисел, которые получены при измерениях, производимых над многими фотонами, «приготовленными» одинаково в начале эксперимента.

## § 6. Взаимодействие наблюдателя с системой

Посмотрим теперь на прибор, изображенный на фиг. 1.1, как на прибор, позволяющий определять состояние поляризации отдельного падающего на него фотона. Предположим, что единичный фотон наблюдается прошедшим в направлении  $A$ . Это позволяет нам заключить, что падающий фотон *не* был полностью поляризован в вертикальном направлении, так как в противном случае он должен был бы выйти из прибора обязательно в направлении  $B$ . Но, к сожалению, кроме этого заключения, мы мало что можем сказать о начальном состоянии поляризации падающего фотона, так как для любого состояния, за исключением состояния полной поляризации в вертикальном направлении, существует отличная от нуля вероятность того, что фотон выйдет

в направлении  $A$ . Получить какую-либо дополнительную информацию об этом нашем единичном фотоне нет никакой возможности. Раз он наблюдался в направлении  $A$ , значит, теперь он стал полностью поляризованным в горизонтальном направлении, и мы не имеем возможности провести какие-либо дополнительные измерения с ним, чтобы определить, какова же была его начальная поляризация до прохождения через призму Николя. Таким образом, акт измерения дает нам *определенную* информацию о состоянии фотона, но в то же время он настолько возмущает этот фотон, что стирает всякую «память» о его предыдущем состоянии.

Предположим теперь, что мы можем повторить рассматриваемый эксперимент много раз с многими «одинаково приготовленными» фотонами, т. е. такими, относительно которых нам известно, что все они находились в совершенно одинаковых состояниях. Таким образом мы сможем измерить вероятности обнаружить фотон в направлениях  $A$  и  $B$ . Если считать, что каждый падающий фотон описывается нормированным вектором  $\xi$  [см. (1.2)], то многократное повторение нашего эксперимента с многими фотонами позволит нам измерить модули комплексных чисел  $E_1$  и  $E_2$ . Разность фаз этих чисел мы никак не сможем при этом определить.

Рассмотрим теперь единичный фотон, падающий на прибор (см. фиг. 1.2), в котором он проходит через *две* призмы Николя: первая из них расщепляет фотон на компоненты, поляризованные в вертикальном и горизонтальном направлениях, а вторая соединяет эти компоненты и восстанавливает исходный фотон. Если в пространстве между двумя призмами Николя не производится никаких измерений, то в соответствующем классическом эксперименте мы имеем сложно устроенный «черный ящик», в который входит падающий пучок и из которого точно такой же пучок выходит с противоположной стороны. Поскольку на основании результатов классического эксперимента можно сделать заключение, что *все* фотоны, составляющие падающий пучок, имеют одинаковую поляризацию и *все* фотоны, выходящие из черного ящика, обладают в точности первоначальной поляризацией, то *каждый отдельный фотон* должен выходить из ящика с той же поляризацией, с какой он в него вошел. Иначе получалось бы противоречие между результатами классического эксперимента и эксперимента с отдельным фотоном.

Здесь, однако, может возникнуть следующий вопрос: если единичный фотон входит в прибор, будучи, скажем, поляризованным под углом  $45^\circ$  к горизонтали, и выходит из него с той же самой поляризацией, то по какому пути он шел между двумя призмами Николя — прошел ли он по пути  $A$  или по пути  $B$ ? На этот вопрос совсем не просто дать ответ, не впадая при этом в противоречие. Если бы фотон прошел по пути  $A$ , то он должен был бы быть в пространстве между призмами Николя поляризован в горизонтальном направлении, так что на пути  $B$ , следовательно,

фотона вовсе не было. Но тогда как мог он восстановить свою первоначальную поляризацию под углом  $45^\circ$  после прохождения второй призмы Николя, попадая на нее по пути  $A$ ? В классическом эксперименте такого парадокса нет, так как падающий пучок представляет собой волну, которая после прохождения через первую призму Николя расщепляется на две компоненты, вновь воссоединяющиеся после прохождения через вторую призму Николя. Чтобы объяснить результаты квантового эксперимента с отдельными фотонами, необходимо предположить, что каждый фотон, хотя и является неделимым квантом излучения, тем не менее, проходя между двумя призмами Николя, должен все же «каким-то образом» расщепляться на две компоненты, которые затем вновь соединяются второй призмой Николя.

*Таким образом, фотон должен обладать как корпускулярными, так и волновыми свойствами.*

Пока фотон не возмущается нашим измерительным прибором, с помощью которого мы пытаемся определить его точное местоположение, он распространяется как волна, описываемая уравнениями Максвелла. Только в те моменты, когда фотон взаимодействует с веществом, проявляются его корпускулярные свойства, выражающиеся в том, что полная энергия фотона  $E = h\nu$  и полный импульс этого фотона  $p = h/\lambda$  должны поглощаться целиком в отдельном акте взаимодействия. *Соотношение между волновыми и корпускулярными свойствами фотона устанавливается на основе статистической интерпретации квантовых явлений.* Точку, в которой поглотится фотон, никогда нельзя указать точно, но всегда нам известна вероятность поглощения фотона в данной произвольной точке. Она пропорциональна интенсивности волны в этой точке. Когда фотон поглощается, он исчезает. Поэтому во всех других точках амплитуда волны, описывающей распространение фотона в пространстве, мгновенно обращается в нуль.

Вернемся теперь к нашему вопросу о том, по какому пути прошел фотон, когда он был между двумя призмами Николя, изображенными на фиг. 1.2. На этот вопрос в квантовой теории нельзя дать никакого ответа, так как фотон «каким-то образом» распространяется сразу по обоим путям. То, что квантовая теория не может указать пути распространения фотона, не следует, однако, рассматривать как ее недостаток. Напротив, квантовая теория утверждает, что этот вопрос бессмыслен. *Квантовая теория говорит, что фотон — это нечто существенно более сложное, чем просто уменьшенный вариант частицы макроскопических размеров или макроскопической волны, с которыми мы постоянно встречаемся в нашей повседневной жизни.* И в самом деле, нет абсолютно никаких оснований считать, что эта субмикроскопическая частица, которую мы никогда не сможем непосредственно увидеть, должна обязательно быть уменьшенным вариантом того, что

мы можем видеть. Фотон, следовательно, представляет собой объект, который распространяется в пространстве как волна, но который может внезапно появиться как частица, причем эти его корпускулярные проявления можно предсказывать только статистически.

Мы обсуждали выше два вопроса: 1) по какому пути ( $A$  или  $B$ ) проходит фотон в приборе, изображенном на фиг. 1.2? и 2) по какому пути ( $A$  или  $B$ ) фотон выходит из призмы Николя, изображенной на фиг. 1.1? Между этими двумя вопросами есть существенная разница, хотя квантовая теория не дает ответа ни на один из них. Первый вопрос просто не имеет никакого смысла, так как основан на ошибочном предположении, что фотон подобен уменьшенному варианту частицы макроскопических размеров. Этот вопрос не имеет никакого отношения ни к одной из экспериментально измеряемых величин, и поэтому обсуждение его напоминает средневековый диспут о том, сколько ангелов могло бы поместиться на острие иглы. Второй вопрос имеет вполне определенный смысл и непосредственно касается экспериментально измеряемых величин, например амплитуд сигналов фотумножителей, установленных вдоль направлений  $A$  и  $B$ . То, что на второй вопрос ответить тоже нельзя, есть важное свойство природы. *Оно составляет решительным образом порвать с определенными положениями классической физики, которые требуют, чтобы значение любой экспериментально наблюдаемой величины можно было всегда предсказывать, если предварительно собрана вся информация, полностью характеризующая состояние системы.*

Вернемся теперь снова к эксперименту, изображенному на фиг. 1.2, и проверим, действительно ли нельзя экспериментально определить, по какому пути ( $A$  или  $B$ ) прошел фотон. Предположим, что на пути  $A$  помещен очень чувствительный прибор, и поэтому фотон, поляризованный в горизонтальном направлении, проходя по пути  $A$ , может вызвать рассеяние электрона в фотумножителе. Так как для этого потребуется передать энергию и импульс от фотона к электрону, то энергия и импульс фотона, а следовательно, и его частота и длина волны изменятся после столкновения с рассматриваемым электроном. Это приведет к тому, что фаза волны, поляризованной в горизонтальном направлении, изменится, когда она будет проходить через вторую призму Николя. Поэтому если даже предположить, что компоненты, поляризованные в вертикальном и горизонтальном направлениях, распространяются как классические волны, то и тогда они уже не смогут больше соединиться во второй призме Николя и воссоздать падающий пучок.

В классическом эксперименте возмущение компоненты, поляризованной в горизонтальном направлении (за счет рассеяния на одном электроном) можно сделать пренебрежимо малым, и падаю-

щий пучок всегда можно восстановить. Существуют, однако, пределы малости этого возмущения, вытекающие из квантовой природы электрона, т. е. из того, что электрону, так же как и фотону, присущ корпускулярно-волновой дуализм. Согласно квантовой теории, начальное положение и начальный импульс электрона известны с некоторой неопределенностью конечной величины. Она приводит к неопределенности в положении той точки на пути фотона, в которой происходит передача импульса, и к неопределенности величины передаваемого импульса. Обе последние неопределенности приводят к неопределенности в фазе, с которой компонента, поляризованная в горизонтальном направлении, будет проходить через призму Николя. Оказывается, что независимо от устройства прибора, предназначенного для детектирования фотона на пути *A*, *неопределенность в фазе будет столь велика, что нарушится всякая когерентность между компонентами фотона*, поляризованными в горизонтальном и вертикальном направлениях. Даже если падающий пучок рассматривать как классическую волну, расщепляющуюся на две компоненты, то все равно фаза компоненты, поляризованной в горизонтальном направлении, изменяется в результате взаимодействия с электроном и угол поляризации получающегося фотона, выходящего из второй призмы Николя, будет отличаться от угла поляризации (например,  $45^\circ$ ) падающего фотона. Выходящий пучок будет *некогерентной* смесью компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, т. е. будет неполяризован. В согласии с нашей корпускулярно-волновой интерпретацией можно сказать, что фотон входит в призму Николя и распространяется по выходе из нее как волна сразу по двум путям *A* и *B*. Но, как только на пути *A* будет зарегистрирован электрон, рассеянный нашим фотоном, мы узнаем, что фотон прошел именно по пути *A* и был поляризован в горизонтальном направлении. Затем он пройдет через вторую призму Николя, не имея поэтому компоненты, поляризованной в вертикальном направлении, и выйдет из нее поляризованным в горизонтальном направлении.

### ***§ 7. Состояния, не изменяющиеся при измерении***

Если единичный фотон входит в прибор, изображенный на фиг. 1.1, то мы, вообще говоря, не можем предсказать, пойдет он в направлении *A* или в направлении *B*. Однако если он все же вышел в направлении *A*, то, значит, он стал полностью поляризованным в горизонтальном направлении, т. е., проходя через призму Николя, претерпел *необратимое* изменение. Совокупность измерений со многими одинаково приготовленными фотонами, как правило, не дает достаточной информации для совершенно однозначного определения начального состояния падающего фотона.



При обсуждении соответствующего классического эксперимента мы обращали внимание на специальные случаи, когда состояние поляризации падающего пучка не меняется при прохождении пучка через прибор и достаточно провести одно измерение для полного определения этого состояния поляризации. Данные специальные случаи свойственны также и фотонам. Фотон, полностью поляризованный в горизонтальном направлении, попадая в прибор, изображенный на фиг. 1.1, будет обязательно наблюдаться в направлении  $A$ , и его поляризация никак не изменится, т. е. он останется поляризованным в горизонтальном направлении. Аналогично будет вести себя и падающий фотон, поляризованный в вертикальном направлении; относительно этого фотона можно с полной определенностью предсказать, что он появится в направлении  $B$  и сохранит неизменной свою поляризацию в вертикальном направлении. В экспериментах с большим числом одинаково приготовленных фотонов, поляризованных в горизонтальном направлении, все фотоны будут наблюдаться по выходе из призмы Николя в направлении  $A$ , и ни один из них не появится в направлении  $B$ . Тогда на основании единственного измерения можно заключить, что все фотоны были полностью поляризованы в горизонтальном направлении. В экспериментах с большим числом падающих фотонов, поляризованных в вертикальном направлении, ситуация будет аналогичной.

Как и в классическом эксперименте, при повороте призмы Николя на  $45^\circ$  все меняется. После такого поворота падающие фотоны, поляризованные в горизонтальном или вертикальном направлении, будут выходить из призмы Николя иногда в направлении  $A$ , иногда в направлении  $B$ , а их поляризация после прохождения призмы станет поляризацией соответственно под углом  $+45$  или  $-45^\circ$ . С другой стороны, поведение фотонов, поляризованных под углом  $+45$  или  $-45^\circ$ , можно будет предсказывать с полной определенностью. Они будут проходить через призму Николя, не изменяя состояния своей поляризации. Если провести эксперимент с большим числом одинаково приготовленных фотонов, поляризованных под углом  $+45$  или  $-45^\circ$ , то все они появятся либо в направлении  $A$ , либо в направлении  $B$  в зависимости от того, равным  $+45$  или  $-45^\circ$  был угол начальной поляризации. Как видим, снова можно полностью определить состояние падающего фотона на основе результатов только одного-единственного эксперимента. И вообще, при любой ориентации призмы Николя для падающего фотона всегда существуют два таких ортогональных состояния поляризации, которые не меняются при прохождении фотона через призму Николя и для которых появление фотона в направлении  $A$  или в направлении  $B$  можно предсказать совершенно точно. Это утверждение справедливо и для оптической системы, состоящей из двух пластинок в четверть волны и рас-

положенной между ними призмы Николя; в таком приборе классический пучок расщепляется в направлениях  $A$  и  $B$  на компоненты с круговой или эллиптической поляризацией. Для такого прибора также существуют два ортогональных состояния падающего фотона, соответственно с круговой или с эллиптической поляризацией, которые не изменяются при прохождении фотона через прибор и для которых можно точно предсказать направление выхода фотона.

Вышеизложенное можно кратко сформулировать на языке матриц. При любой ориентации призмы Николя (или прибора из призмы Николя и пластинок в четверть волны) векторы, описывающие пучок или фотон, распространяющийся в направлении  $A$  и  $B$ , можно представить как результат действия некоторого линейного оператора или матрицы на вектор, описывающий падающий пучок или фотон. Состояния, характеризуемые собственными векторами этих матриц, описывают как раз те состояния фотона, которые не меняются при прохождении через прибор. Так как все матрицы имеют размерность  $2 \times 2$ , то у них по два линейно независимых собственных вектора. Следовательно, для падающего фотона всегда существуют именно два состояния, обладающие характерными свойствами, описанными выше.

При любой ориентации призмы Николя (или прибора из призмы Николя и пластинок в четверть волны) существуют два различных состояния поляризации, для которых результат измерения можно предсказать совершенно точно. Но *не существует ни одного такого состояния поляризации фотона, для которого можно точно предсказать результаты любых двух экспериментов разного типа.*

Рассмотрим, например, два эксперимента: эксперимент с призмой Николя, расщепляющей падающий пучок на компоненты, поляризованные в горизонтальном и вертикальном направлениях, и эксперимент с прибором из призмы Николя и пластинок в четверть волны, расщепляющим пучок на компоненты, поляризованные по правому и левому кругу. Если падающий фотон имеет линейную поляризацию в горизонтальном или вертикальном направлении, то результат первого эксперимента можно предсказать точно, а результат второго — нельзя. Если падающий фотон поляризован по правому или левому кругу, то, наоборот, результат второго эксперимента можно точно предсказать, а первого — нельзя. *Невозможно приготовить фотон с таким состоянием поляризации, чтобы можно было точно предсказать результаты обоих рассматриваемых экспериментов с ним.* Это отнюдь не удивительно, так как в утверждении, гласящем, что фотон не может быть одновременно поляризован линейно и поляризован по кругу, нет ничего парадоксального. Нет ничего удивительного в том, что эти два типа измерений несовместимы друг с другом, так как известно, что состояния полной круговой и полной линейной

поляризации несовместимы даже для классического пучка поляризованного света. Мы, однако, увидим, что *в квантовой физике несовместимыми могут оказаться и такие свойства, которые в классической физике несовместимыми не являются*. Невозможно, например, приготовить такое состояние частицы, чтобы можно было одновременно точно предсказать результат измерения ее импульса и ее координаты.

Помните, однако, что невозможность точно предсказать результаты обоих экспериментов по измерению поляризации сразу — это *чисто квантовый эффект*, вытекающий из неделимости фотона. В классической физике можно точно предсказать, что поляризованный по кругу пучок, падающий на прибор, изображенный на фиг. 1.1, расщепится на два луча половинной интенсивности, выходящих в направлениях  $A$  и  $B$ .

### § 8. Измерения с единичными фотонами

Если через прибор, изображенный на фиг. 1.1, проходит классический пучок, то доля его интенсивности, приходящаяся на каждую из компонент, выходящих в направлении  $A$  и  $B$ , может иметь любое значение от 0 до 1 в зависимости от поляризации падающего пучка. Когда через прибор проходит единичный фотон, то доля интенсивности может принимать только значение 0 или 1, а непрерывная последовательность промежуточных значений запрещена. Эти разрешенные в эксперименте с единичным фотоном значения для доли интенсивности очень просто выражаются на языке матриц: они являются *собственными значениями той матрицы, которая описывает данное измерение*, например матриц  $A$ ,  $B$  и  $M$ , определяемых (1.6) и (1.11).

Используя матрицы для описания результатов различных экспериментов, можно выразить все характерные особенности экспериментов с единичными фотонами в очень сжатой форме: любой результат такого эксперимента описывается некоторой эрмитовой матрицей. Разрешенные значения для результатов отдельного измерения с единичным фотоном как раз равны собственным значениям этой матрицы. Состояние фотона после данного измерения описывается собственным вектором матрицы, соответствующим измеренному собственному значению. Для пучка фотонов, каждый из которых находится в состоянии, описываемом вектором  $\xi$ , *среднее* значение результатов измерений дается средним значением матрицы для вектора  $\xi$ . Если  $\xi$  — собственный вектор матрицы, то среднее значение совпадает с собственным значением. Тогда результаты измерения для отдельных фотонов из пучка будут совершенно одинаковыми и состояние выходящего из прибора фотона будет таким же, как состояние падающего. Если же  $\xi$  не является собственным вектором матрицы, то результаты измерения для различных фотонов из пучка будут *неодина-*

ковыми и их нельзя точно предсказать; иногда получится одно собственное значение, иногда — другое.

Мы видели, что, как правило, нельзя приготовить фотон в таком состоянии, чтобы можно было точно предсказать результаты двух различных экспериментов с ним. Это очень легко видеть, используя матрицы. Каждое из двух данных измерений описывается своей матрицей, причем результат измерения можно точно предсказать лишь в том случае, когда состояние падающего фотона описывается собственным вектором этой матрицы. Для точного предсказания результатов обоих экспериментов необходимо, чтобы вектор, описывающий фотон, был бы собственным вектором сразу обеих рассматриваемых матриц. Если они не имеют общих собственных векторов, то описывают несовместимые измерения.

Если обе матрицы коммутируют, то их можно одновременно диагонализировать, и они будут иметь общие собственные векторы. Таким образом, *совместимость двух измерений связана с коммутативностью соответствующих матриц. Две коммутирующие матрицы описывают совместимые измерения. Две некоммутирующие матрицы описывают измерения, которые в общем случае несовместимы.*

## § 9. Матрицы и измерения в квантовой механике

Матричный формализм, развитый нами для поляризованных фотонов, широко используется в квантовой механике; после необходимого обобщения его можно применить для описания более сложных систем, имеющих большое число степеней свободы. Вот в чем состоит это обобщение.

Состояние динамической системы (подобное состоянию поляризации фотона) описывается комплексным вектором в векторном пространстве. Этот вектор имеет, вообще говоря, много компонент. Он не обязательно должен быть двухкомпонентным, в некоторых случаях он может иметь бесконечное число компонент.

Динамические переменные, которые мы можем измерять, описываются эрмитовыми матрицами. Собственные значения каждой матрицы дают те разрешенные значения, которые мы можем получить в результате отдельного измерения соответствующей переменной (например, поляризации фотона в горизонтальном или вертикальном направлении, импульса электрона и т. д.). Если вектор, описывающий состояние системы (например, фотона), является собственным вектором матрицы, то результат соответствующего измерения для него всегда можно совершенно точно предсказать: он просто должен быть собственным значением матрицы, соответствующим этому собственному вектору. Если вектор, описывающий систему, не является собственным вектором матрицы,

то результат единичного измерения данной величины точно предсказать нельзя. Будут появляться все собственные значения матрицы с некоторым статистическим разбросом. Среднее значение динамической переменной в рассматриваемом состоянии, определенное по результатам большого числа измерений, будет даваться математическим ожиданием матрицы для вектора, описывающего рассматриваемое состояние системы.

Выше при эвристическом объяснении экспериментов с единичными фотонами мы опирались на тот принцип, что средний результат измерений, произведенных для большого числа фотонов, должен совпадать с результатом классического измерения. Это частный случай более общего принципа квантовой механики, называемого «принципом соответствия». При рассмотрении любой задачи квантовой механики мы всегда можем указать такой ее предельный случай, как, например, случай очень большого числа фотонов, для которого должны выполняться положения классической физики. Правильное квантовомеханическое описание должно переходить в этом пределе в классическое описание.

### Задачи

Предположим, что пучок света, поляризованного в вертикальном направлении, *последовательно* проходит через:

- а) призму Николя, пропускающую только свет, поляризованный в вертикальном направлении;
- б) призму Николя, пропускающую только свет, поляризованный под углом  $+45^\circ$ ;
- в) призму Николя, пропускающую только свет, поляризованный в горизонтальном направлении;
- г) область магнитного поля, в которой вследствие эффекта Фарадея плоскость поляризации поворачивается на угол  $+45^\circ$ ;
- д) пластинку в четверть волны, которая создает между компонентами, поляризованными в вертикальном и горизонтальном направлениях, разность фаз в  $1/2 \pi$ ;
- е) призму Николя, пропускающую только свет, поляризованный под углом  $-45^\circ$ .

*Ответьте на следующие вопросы:*

1. Если амплитуда падающего пучка света равна  $E$ , то какова будет амплитуда и поляризация света после каждого этапа а, б, в, г, д и е?

2. Если через систему пропускается единичный фотон, поляризованный в вертикальном направлении, то что будет наблюдаться после каждого этапа а, б, в, г, д и е?

3. Допустим, что мы хотим измерить поляризацию света, используя в качестве измерительного прибора призму Николя, изображенную на фиг. 1.1. Призму Николя ориентируем так, чтобы ее оптические оси были направлены по горизонтали и вертикали. Поместим наш прибор в описанную выше оптическую систему после каждого этапа а, б, в, г, д и е. Что будет показывать этот прибор? Дают ли показания прибора достаточную информацию для определения поляризации света на каждом этапе?

4. Вопрос тот же, что и в задаче 3, но оси призмы Николя ориентированы под углом  $45^\circ$  к вертикали и горизонтали.

5. Допустим, что пучок света амплитуды  $E$ , поляризованный в вертикальном направлении, описывается вектором

$$\xi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}.$$

Какими векторами  $\xi_a$ ,  $\xi_b$ ,  $\xi_v$ ,  $\xi_g$ ,  $\xi_d$  и  $\xi_e$  будет описываться пучок света после каждого этапа а, б, в, г, д и е?

6. На каждом этапе а, б, в, г, д и е состояние светового пучка преобразуется и представляется то одним, то другим вектором. Каждое такое преобразование можно, следовательно, описать с помощью некоторой матрицы. Например, преобразование на этапе «а», на котором пропускается только свет, поляризованный в вертикальном направлении, описывается матрицей

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Какими матрицами  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$  и  $F$  описываются соответствующие преобразования на каждом этапе б, в, г, д и е?

Возьмите в качестве начального вектор  $\begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$  и подействуйте на него поочередно матрицами  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$  и  $F$ . Покажите, что векторы для каждого этапа совпадают с полученными в задаче 5.

7. Последовательно производимые преобразования можно описать матрицами, являющимися произведениями матриц отдельных преобразований. Так, произведение матриц  $BA$  описывает преобразование, в котором сначала действует матрица  $A$ , а затем матрица  $B$ . Вычислите матрицы, являющиеся произведениями  $BA$ ,  $DC$  и  $FE$ . Возьмите в качестве начального вектор  $\begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$  и подействуйте на него поочередно этими тремя матрицами. Покажите, что получаются те же векторы, как и в задаче 6. Заметьте, что произведение матриц  $BA$  не эквивалентно произведению  $AB$ . Последнее описывает преобразование, в котором сначала действует матрица  $B$ ,

а затем  $A$ . Постройте произведение матриц  $FEDCBA$  и покажите, что в результате действия этого произведения на начальный вектор  $\begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$  получается сразу окончательный вектор  $\xi_e$ .

8. Возьмите вместо осей координат  $x$  и  $y$  оси, повернутые на угол  $45^\circ$ . Тогда вектор  $\begin{pmatrix} 0 \\ E \end{pmatrix}$  будет описывать пучок, поляризованный под углом  $-45^\circ$ . Падающий пучок, поляризованный в вертикальном направлении, будет описываться вектором

$$\xi_0 = \begin{pmatrix} -E/\sqrt{2} \\ E/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Решите задачу, аналогичную задачам 5 и 6, используя новый базис. Соответствующие векторы и матрицы помечайте штрихом (например,  $\xi'_a, \xi'_b, A', B'$ ).

9. Найдите собственные значения и собственные векторы матриц  $A, B, C, D, E$  и  $F$ . Какие из этих матриц ортогональны? Чему равны собственные значения матриц  $A', B', C', D', E'$  и  $F'$ ?

10. Штрихованные векторы  $\xi'_a, \xi'_b$  и т. д. из задачи 9 связаны с исходными векторами  $\xi_a, \xi_b$  и т. д. преобразованием поворота координатных осей на  $45^\circ$ . На языке матриц это можно записать в виде матричного равенства

$$\xi'_k = R\xi_k,$$

в котором  $k = 0, a, b, c, d$  или  $e$ , а  $R$  — некоторая ортогональная матрица. Найдите явный вид матрицы  $R$  и обратной ей матрицы  $R^{-1}$ . Используя матрицу  $R$ , найдите матричное соотношение, связывающее матрицы  $A$  и  $A'$ . Покажите, что в точности то же соотношение имеет место для матриц  $B, D$  и  $E, B', D'$  и  $E'$ .

11. Возьмите преобразование

$$\xi''_k = U\xi_k,$$

в котором матрица  $U$  имеет вид

$$U = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Найдите явный вид семи векторов  $\xi''_0, \xi''_a, \dots, \xi''_e$ , получаемых при этом преобразовании, и явный вид соответствующих матриц  $A'', \dots, F''$ . Будет ли матрица  $U$  ортогональной? Каков физический смысл задаваемого ею преобразования? Какие состояния поляризации описывают базисные векторы этого преобразования, т. е. векторы  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  и  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ?

12. Вычислите квадраты векторов  $\xi_a$ ,  $\xi_b$ ,  $\xi_v$ ,  $\xi_r$ ,  $\xi_d$  и  $\xi_e$  и покажите, что они совпадают с амплитудами из задачи 1. Найдите также квадраты векторов  $\xi'_a$ ,  $\xi'_v$  и  $\xi'_d$  из задачи 8 и векторов  $\xi''_a$ ,  $\xi''_v$  и  $\xi''_d$  из задачи 11. Сравните полученные числа со значениями квадратов для соответствующих нештрихованных векторов.

13. Вычислите величину

$$\langle M \rangle = \frac{(\xi | M | \xi)}{(\xi | \xi)}$$

для вектора  $\xi$  общего вида из задачи 5 и для матрицы  $M$ , определенной формулой (1.14). Вычислите после этого средние значения  $\langle M \rangle$  для векторов  $\xi_a$ ,  $\xi_b$ ,  $\xi_v$ ,  $\xi_r$ ,  $\xi_d$ ,  $\xi_e$ . Как нужно интерпретировать полученные числовые значения и как связать их с результатами соответствующих измерений из задачи 3? Вычислите средние значения  $\langle M \rangle$  для векторов  $\xi'_a$ ,  $\xi'_b$ ,  $\xi'_v$ ,  $\xi'_r$ ,  $\xi'_d$ ,  $\xi'_e$  и интерпретируйте их, связав с результатами измерений из задачи 4.

14. Вычислите средние значения  $\langle M \rangle$  для векторов  $\xi''_a$ ,  $\xi''_b$ ,  $\xi''_v$ ,  $\xi''_r$ ,  $\xi''_d$ ,  $\xi''_e$ . По аналогии с задачей 13 попытайтесь сопоставить полученные числа с результатами экспериментальных измерений. Каким измерениям соответствуют  $\langle M \rangle$ ?

15. Найдите явный вид матрицы  $M'' = UM\tilde{U}^*$ , где  $U$  — матрица из задачи 11. В задаче 14 замените матрицу  $M$  на  $M''$  и сравните полученные числовые результаты с числовыми результатами двух предыдущих задач.

16. Установите, обладают ли матрицы  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ ,  $E$  и  $F$  из задачи 6 свойствами ортогональности, эрмитовости, унитарности, и посмотрите также, не являются ли они проекционными операторами. Укажите, в чем заключается физический смысл каждого из этих математических свойств. Установите, какими из указанных свойств обладают матрицы  $R$ ,  $U$  и  $M$  из задач 10, 11 и 13.

17. Пучок поляризованного света пропускается через слой вещества, находящийся в магнитном поле, которое непрерывно поворачивает плоскость поляризации этого пучка, так что полный угол поворота составит  $2\pi$ . Данный пучок можно описать двумерным комплексным вектором состояния  $\xi$  [см. (1.2)]. Во всякой точке  $z$  в слое состояние поляризации пучка можно описать вектором  $\xi(z)$ , зависящим от  $z$ . Если длина слоя вещества равна  $L$ , то на элементе длины  $dz$  плоскость поляризации пучка поворачивается на угол  $2\pi L^{-1}dz$ . Рассматривая этот бесконечно малый поворот, запишите выражение для производной  $d\xi(z)/dz$ . При этом используйте те же базисные векторы, что и в задаче 5. На полученное выражение для производной  $d\xi/dz$  посмотрите как на диффе-



ренциальное уравнение и покажите, что его решение можно записать в виде  $\xi(z) = e^{iKz} \xi(0)$ . Какими математическими свойствами обладает матрица  $K$ ? Какими математическими свойствами обладает матрица  $e^{-iKz}$ ? Найдите явный вид последней матрицы.

18. Предположите, что  $\xi(0)$  — пучок, поляризованный в вертикальном направлении, и вычислите среднее значение

$$\langle M \rangle = \frac{(\xi | M | \xi)}{(\xi | \xi)},$$

где матрица  $M$  дается формулой (1.14). Среднее значение  $\langle M \rangle$  будет теперь функцией  $z$ . Как связать среднее значение  $\langle M \rangle$  с результатом измерения поляризации пучка в точке  $z$ ?

19. Вычислите производную  $(d/dz) \langle M \rangle$ , коммутатор  $[K, M]$  и среднее значение

$$\langle [K, M] \rangle = \frac{(\xi | [K, M] | \xi)}{(\xi | \xi)}.$$

Покажите, что соотношение между этими средними значениями можно установить другим способом, подставив формулу

$$\xi(z) = e^{iKz} \xi(0)$$

в формулу

$$\langle M \rangle = \frac{(\xi | M | \xi)}{(\xi | \xi)}$$

и продифференцировав полученный результат по  $z$ .

20. Найдите явный вид матрицы

$$M(z) = e^{iKz} M e^{-iKz}.$$

Найдите далее значение среднего  $\langle M \rangle$  для матрицы  $M(z)$  и вектора  $\xi(0)$ . Сравните полученный результат с результатом задачи 18. Вычислите затем производную  $(d/dz) M(z)$ . Результат можно рассматривать как уравнение движения для оператора  $M(z)$ . Заметьте, что результат физического измерения, связанный с вычисленным средним  $\langle M \rangle$ , можно описать с помощью матриц двояко: либо используя не зависящую от  $z$  матрицу  $M$  и зависящий от  $z$  вектор состояния  $\xi$ , либо используя зависящую от  $z$  матрицу  $M(z)$  и фиксированный вектор состояния  $\xi(0)$ . Эти два способа описания в квантовой механике отвечают соответственно «представлению Шредингера» и «представлению Гейзенберга».

21. Найдите собственные значения и собственные векторы матрицы  $K$ . Каковы те физические состояния, которые описываются этими собственными векторами? Найдите унитарное преобразование, с помощью которого осуществляется переход к представлению, в котором собственные векторы матрицы  $K$  являются базисными. Запишите вектор состояния  $\xi(z)$  в этом новом пред-

ставлении и обратите внимание на существенно более простой характер зависимости его от  $z$ . Запишите также в новом представлении матрицы  $M$ ,  $K$  и  $M(z)$  и убедитесь, что матрица  $M$  имеет в нем более сложный вид. Вычислите среднее  $\langle M \rangle$  в новом представлении и покажите, что получается в точности тот же результат, что и в задаче 18.

22. Рассмотрите пучок поляризованных фотонов, падающих на измерительный прибор, изображенный на фиг. 1.1. Если считать, что падающий пучок описывается вектором состояния  $\xi = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}$ , то разность измеряемых интенсивностей компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, будет даваться величиной  $(\xi | M | \xi)$  с матрицей  $M$ , определенной (1.11). Предположите, что падающий пучок состоит из одного фотона. При каких условиях можно точно предсказать результат рассматриваемого эксперимента? Для каждого случая точного предсказания составьте явное выражение для вектора состояния фотона, нормированного так, что  $|E_x|^2 + |E_y|^2 = 1$ . Какая связь существует между этими векторами состояния и матрицей  $M$ ?

23. Рассмотрите эксперимент, в котором поляризация измеряется прибором с призмой Николя, повернутой на  $45^\circ$  относительно первоначального положения, изображенного на фиг. 1.1. Этот прибор измеряет разность интенсивностей компонент, поляризованных под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ . Найдите такую матрицу  $K$ , чтобы ее диагональный матричный элемент  $(\xi | K | \xi)$  описывал результаты рассматриваемого эксперимента. Укажите условия, при которых результат описываемого измерения, произведенного с единичным фотоном на этом приборе, можно было предсказать точно, и найдите соответствующие векторы состояний фотона. Существует ли такое состояние единичного падающего фотона, чтобы можно было одновременно совершенно точно предсказать результаты рассматриваемого измерения и измерения из задачи 22? Как связать ответ со значением коммутатора  $[K, M]$ ?

24. Решите задачу, аналогичную задаче 23. Но теперь рассмотрите прибор, в котором перед призмой Николя помещена соответствующим образом ориентированная пластинка в четверть волны. Этот прибор будет измерять разность интенсивностей компонент падающего пучка, поляризованных по левому и правому кругу. Матрицу, описывающую это измерение, обозначьте через  $L$ .

25. Пучок поляризованных фотонов пропускается через прибор, изображенный на фиг. 1.2. Ответьте на следующие вопросы:

а) Что будет наблюдаться на выходе из прибора, если на первую призму Николя падает единичный поляризованный фотон

и в пространстве между призмами Николя не производится никаких измерений и ничто не возмущает пучок?

б) По какому пути распространялся фотон, будучи между призмами Николя, если были выполнены условия п. «а»?

в) Что будет наблюдаться в эксперименте, описанном в п. «а», если между призмами Николя поместить такой непрозрачный предмет, который задерживает компоненту, поляризованную в горизонтальном направлении, а на компоненту, поляризованную в вертикальном направлении, вовсе не влияет?

г) Что будет наблюдаться на выходе из прибора, если на него падает пучок фотонов, поляризованных в горизонтальном направлении, причем при каждом появлении фотона в горизонтальном канале регистрируется сигнал (например, рассеянный фотоном электрон), но фотон продолжает двигаться и проходит через вторую призму Николя?

26. Решите задачу, аналогичную задаче 3, но с частично поляризованным падающим пучком, описываемым векторами (1.27). Найдите явный вид матриц плотности пучка  $\rho_0$ ,  $\rho_a$ ,  $\rho_b$ ,  $\rho_v$ ,  $\rho_g$ ,  $\rho_d$ , описывающих пучок на каждом этапе эксперимента.

27. Возьмите в качестве начальной матрицу плотности  $\rho_0$  и проведите преобразования матриц плотности, аналогичные преобразованиям векторов в задачах 6 и 7.

## **II. Передача импульса связанной системе и эффект Мессбауэра**

### **Введение**

Этот раздел, включающий гл. 2—4, знакомит читателя с интересными проблемами «формфакторной физики» на переднем крае самых современных исследований, а также со многими важными физическими понятиями и математическими методами. Изложение материала начинается с очень элементарного уровня, а именно с описания поведения свободной частицы и гармонического осциллятора и разъяснений, как переходить от одного базиса к другому.

С понятием «формфактора» мы встречаемся при любых исследованиях структуры сложных микроскопических систем, например в теории рассеяния рентгеновских лучей на кристалле, при изучении рассеяния света атомами, рассеяния электронов на нуклонах и ядрах и в  $\beta$ -распаде. Каждый такой процесс описывается своей амплитудой перехода, обязательно содержащей формфактор, который зависит только от свойств связанной системы (например, кристалла) и кинематических величин, характеризующих процесс перехода (величин передаваемых импульсов и энергий или длин волн и частот). Формфактор не зависит ни от каких других характеристик элементарного акта излучения, рассеяния или поглощения. Такая «самостоятельность» и независимость формфактора от характера элементарного процесса позволяет вычислить его с помощью самых элементарных соображений и получить единое, унифицированное описание многих явлений в разных областях физики.

Формфакторная физика служит прекрасной отправной точкой для понимания корпускулярно-волнового дуализма, принципа дополнительности и принципа неопределенности, так как изучаемые в ней (испускаемое, поглощаемое и рассеиваемое) излучения

можно описывать как классические волны или как пучки классических частиц. В результате и сами формфакторы можно вычислять двумя (дополняющими друг друга) способами: используя величины длин волн и частот (при волновом описании) или величины импульсов и энергий (при корпускулярном описании). При волновом подходе формфактор характеризует пространственные размеры и физическую структуру системы в обычном пространстве, которые определяются им потому, что волны, приходящие от разных точек или частей системы, имеют различные фазы. При корпускулярном подходе формфактор характеризует структуру системы в импульсном пространстве, которая определяется им потому, что процессы передачи энергии и импульса от излучения к системе зависят от распределения импульсов в изучаемом состоянии системы. Особенно простым примером теории формфактора служит эффект Мессбауэра. Его многие основные черты можно проследить даже на чрезвычайно упрощенной модели, в которой предполагается, что ядро, испускающее  $\gamma$ -квант, связано некоторым внешним гармоническим осцилляторным потенциалом (а не полем кристалла) и процесс излучения не описывается детально, а просто считается неким «внезапным» переходом с изменением импульса излучающего ядра.

Гл. 2 мы начинаем с обсуждения на элементарном уровне кинематических законов сохранения импульса и энергии при резонансном ядерном поглощении в случае свободного ядра, которое сначала рассматривается классически, а затем квантовомеханически с использованием плоских волн. Далее, полученные результаты мы применяем к ядру, описываемому в приближении гармонического осциллятора, выводим дебай-валлеровский формфактор и останавливаемся подробно на различных его интерпретациях, прекрасно иллюстрирующих принцип неопределенности, принцип дополнительности и корпускулярно-волновой дуализм квантовой механики. Чтобы вычислить моменты спектра энергий излученных или поглощенных  $\gamma$ -квантов, мы приводим несколько элементарных примеров, позволяющих научиться работать с операторами и унитарными преобразованиями. Температурный сдвиг мессбауэровской линии сначала мы объясняем как эффект, возникающий из-за различия массы ядра в начальном (возбужденном) и конечном (основном) состояниях. После этого мы показываем, что температурный сдвиг можно считать доплеровским сдвигом второго порядка, возникающим в случае движения источника электромагнитного излучения, и рассматривать его как прекрасный пример знаменитого «парадокса близнецов» из теории относительности, в согласии с которым ядро, колеблющееся в потенциальной яме, оказывается «моложе» другого ядра, находящегося в покое все это время. Все эти рассуждения должны быть совершенно ясны любому читателю, разобравшемуся в основных матема-

тических приемах квантовой механики и познакомившемуся с теорией гармонического осциллятора.

Гл. 3 мы начинаем с обобщения рассуждения, данного в гл. 2, на случай эффекта Мессбауэра для ядра в твердом теле. Мы проводим подробные вычисления для гармонического кристалла, используя разложение по нормальным колебаниям для сведения задачи к задачам об отдельных гармонических осцилляторах, для каждого из которых справедливы формулы гл. 2. Эффект Мессбауэра в случае ядра, находящегося в тепловом равновесии с твердым телом, дает прекрасный повод для обсуждения различия между «статистически смешанными» и «чистыми» квантовыми состояниями и для разъяснения некоторых правил работы с операторами, сформулированными в гл. 2. В результате мы получаем важные формулы, содержащие экспоненциальные функции, в показатели которых входят гейзенберговские операторы, и пространственно-временные корреляционные функции. Мы показываем, что окончательная формула соответствует классическому выражению для «частотно-модулированного» излучения, испускаемого движущимся осциллятором. Затем, используя решения гейзенберговских уравнений движения для гармонического осциллятора и правила работы с экспоненциальными функциями от некоммутирующих операторов, мы получаем точную форму  $\gamma$ -спектра, излучаемого ядром в гармоническом кристалле, находящимся в тепловом равновесии с ним. Рассмотренные далее релаксационные эффекты хорошо иллюстрируют эквивалентность «энергетического» и «временного» описаний, дополняющих друг друга.

В гл. 2 и 3 детали акта излучения ни разу подробно не рассматриваются, а все изменения состояния излучающего ядра описываются исключительно с помощью законов сохранения энергии и импульса. В гл. 4 разобраны процессы излучения, протекающие с передачей импульса связанной системе, причем при расчетах используется формализм вторичного квантования, описанный в гл. 5, метод феноменологического гамильтониана, а также «золотое правило» из временной теории возмущений, развитой в гл. 7. Читатели, не знакомые с этими вопросами, должны сначала прочитать гл. 5 и 7, а потом уже гл. 4.

Феноменологический гамильтониан для свободного ядра, излучающего фотон, мы записываем с помощью вторично квантованных операторов рождения и уничтожения фотонов и ядер в основном и возбужденном состояниях. Использование законов сохранения и принципов инвариантности позволяет получить важные ограничения на вид феноменологического гамильтониана. Путем добавки некоторого потенциала к гамильтониану для свободного ядра легко построить феноменологический гамильтониан для связанного ядра. Используя формулу «золотого правила», можно вообще показать, что вероятность перехода в случае связанного

ядра распадается на произведение вероятности соответствующего перехода для свободного ядра и формфактора, зависящего только от величины переданного импульса и свойств связанной системы, но не зависящего от того, как детально проходил процесс излучения. Практически такие же методы мы используем затем при рассмотрении рассеяния фотонов на связанных атомах, при изложении теории  $\beta$ -распада и теории рассеяния электронов на сложных ядрах. Легко показать, что в каждом из этих случаев выражение для вероятности перехода простым образом факторизуется на указанные выше множители и непосредственно получается выражение для соответствующего формфактора.

## Глава 2. ЭФФЕКТ МЕССБАУЭРА ДЛЯ ЯДРА, СВЯЗАННОГО ОСЦИЛЛЯТОРНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

### § 1. Сохранение импульса при резонансном ядерном поглощении

Для всех тех, кто начинает заниматься квантовой механикой, теория эффекта Мессбауэра доставляет идеальный способ войти в суть предмета. На эффекте Мессбауэра можно многому научиться. Прежде всего история этого эффекта показывает, что в наше время аспирант за свою диссертацию может получить Нобелевскую премию по физике. Мессбауэр не работал в модной области теоретической физики элементарных частиц и не думал, как это делают другие, что его осенит великая идея, которая позволит разрешить ему все загадки мироздания. Напротив, он начал трудиться над одной сложной и трудоемкой экспериментальной задачей, имевшей очень скромную цель — измерить время жизни одного возбужденного уровня ядра  $^{191}\text{Ir}$ . В ходе своей экспериментальной работы он открыл необычные явления, которые, правда, сначала совсем не понял. Профессора, к которым он обратился за консультацией, тоже не смогли ему ничего сказать. Мессбауэр, однако, не успокоился, не прекратил работу, а провел дальнейшие эксперименты и теоретические исследования, принесшие ему в конце концов Нобелевскую премию.

Если у кого-нибудь из читателей возникло честолюбивое желание получить Нобелевскую премию, ему можно лишь посоветовать тщательно обдумать выбор темы для своей диссертации, особенно если он еще не решил, чем стоит заняться — красивой математикой, например применениями теории групп для создания новой теории элементарных частиц, или же скромной экспериментальной задачей, скажем измерением времени жизни ядерных уровней обнаруженных на ускорителе. Автор не может обещать, конечно, читателю Нобелевскую премию за то, что тот измерит времена жизни нескольких ядерных уровней, но почти наверняка гарантирует ему, что все, что тот сделает в своей диссертации, посвященной физике элементарных частиц, не принесет ему Нобелевской премии.

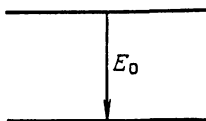
Физическое содержание эффекта Мессбауэра можно очень легко уяснить после нескольких лекций. Все, что нужно знать, не выходит за рамки элементарной квантовой механики и должно было быть понятно физикам задолго до открытия самого эффекта. Однако основным положениям элементарной квантовой механики не было



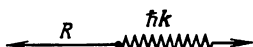
отдано должное, так как для этого надо было применить ее одновременно и в ядерной физике, и в физике твердого тела. Физики, занимающиеся атомным ядром, не знали физики твердого тела, и, наоборот, физики, занимающиеся твердым телом, не знали ядерной физики.

На эффект Мессбауэра можно посмотреть с разных точек зрения, чтобы проиллюстрировать на его примере многие фундаментальные положения квантовой механики. Так, его можно рассматривать как пример процесса, при котором происходит передача импульса связанной квантовой системе. Такие процессы важны в широком классе задач, встречающихся во всех областях физики. Сюда относятся процессы рассеяния света атомами, рассеяния рентгеновских лучей кристаллами, рассеяния электронов очень высокой энергии ядрами и ядерный  $\beta$ -распад.

Рассмотрим ядро массы  $M$ , находящееся в возбужденном состоянии и имеющее энергию  $E_0$ , отсчитанную относительно энергии основного состояния (фиг. 2.1). Это ядро может распасться и перейти



Фиг. 2.1.



Фиг. 2.2.

в основное состояние, испуская  $\gamma$ -квант. Основываясь на законе сохранения энергии, можно было бы ожидать, что энергия  $\gamma$ -кванта будет равна  $E_0$ , т. е. энергии, потерянной ядром при переходе. В таком случае  $\gamma$ -квант мог бы поглотиться другим ядром в точности такого же типа, но находящимся в основном состоянии. Энергии  $E_0$   $\gamma$ -кванта было бы как раз достаточно, чтобы перевести ядро в его возбужденное состояние. Поглощение  $\gamma$ -кванта, имеющего достаточную энергию, чтобы вызвать переход между двумя ядерными уровнями, называется «резонансным поглощением».

Только что описанный процесс обычно не идет, так как энергия излученного  $\gamma$ -кванта не равна в точности  $E_0$ . Пользуясь законом сохранения энергии, мы пренебрегли законом сохранения импульса и не учли кинетическую энергию движения ядра. Если до излучения  $\gamma$ -кванта ядро находилось в покое, то, согласно закону сохранения импульса для системы «ядро — фотон», оно должно после излучения  $\gamma$ -кванта испытать отдачу, как показано на фиг. 2.2. Если кинетическая энергия отдачи ядра равна  $R$ , то энергию  $E_\gamma$  излученного  $\gamma$ -кванта можно определить из закона сохранения энергии, т. е.

$$E_\gamma = E_0 - R. \quad (2.1)$$

Если волновой вектор  $\gamma$ -кванта равен  $k$ , то его импульс равен соответственно  $\hbar k$  и поэтому

$$E_\gamma = \hbar\nu = \hbar kc, \quad (2.2)$$

где  $\nu$  — частота  $\gamma$ -кванта.

Из закона сохранения импульса следует, что импульс отдачи ядра равен  $-\hbar k$ . Таким образом, из формул (2.1) и (2.2) мы получаем

$$R = \frac{(\hbar k)^2}{2M} = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2} = \frac{(E_0 - R)^2}{2Mc^2}. \quad (2.3)$$

Как правило, для определения энергии  $R$  не нужно решать квадратное уравнение (2.3), так как энергия  $R$  столь мала по сравнению с  $E_0$  и  $E_\gamma$ , что в правой части уравнения (2.3) ею можно пренебречь. Таким образом, имеем

$$R = \frac{E_\gamma^2}{2Mc^2} \approx \frac{E_0^2}{2Mc^2}. \quad (2.4)$$

Вот типичный пример. Возьмем переход с энергией 14 кэВ в ядре  $^{57}\text{Fe}$ , тогда  $E_0 = 14 \cdot 10^3$  эВ, а  $Mc^2$ , энергия покоя ядра  $^{57}\text{Fe}$ , равна приблизительно  $57 \cdot 10^9$  эВ. (Полезно запомнить, что энергия покоя нуклона имеет примерно величину  $1\text{ГэВ} = 10^9$  эВ.) По формуле (2.4) получаем, что  $R \approx 2 \cdot 10^{-3}$  эВ, а отношение  $R/E_0 \approx 1,4 \cdot 10^{-7}$  действительно очень малая величина. Таким образом, приближенная формула (2.4), безусловно, справедлива.

Однако энергия  $R$  мала не настолько, чтобы с ней вообще можно было не считаться при рассмотрении процессов резонансного поглощения  $\gamma$ -квантов ядрами. Дело в том, что резонансное поглощение  $\gamma$ -кванта ядром может произойти в том, и только в том случае, когда энергия его будет равна энергии ядерного перехода с точностью до величины порядка естественной ширины линии. Естественная ширина линии ядерного  $\gamma$ -излучения имеет порядок  $10^{-5}$  эВ или еще меньший. Она значительно меньше  $R$ .

Совершенно аналогично можно применить закон сохранения импульса к процессу поглощения  $\gamma$ -кванта ядром. Если ядро, поглотившее  $\gamma$ -квант, первоначально находилось в покое, то после поглощения оно должно обладать кинетической энергией  $R$ . Таким образом, для резонансного поглощения необходимо иметь  $\gamma$ -квант с энергией не  $E_0$ , а  $E_0 + R$ , причем энергия излученного  $\gamma$ -кванта, как мы видели выше, равна только  $E_0 - R$ .

Итак, в разбираемом случае энергия излученного ядром  $\gamma$ -кванта, оказывается слишком малой для того, чтобы произошло поглощение его другим аналогичным ядром, и резонансное поглощение просто не может произойти.

## § 2. Квантовомеханическое рассмотрение случая свободного ядра

Опишем теперь изменения энергии и импульса излучающего или поглощающего  $\gamma$ -квант ядра на языке квантовой механики. Полная теория должна, разумеется, включать как описание внутренней структуры ядра, определяющей положение его уровней энергии, так и квантовую теорию процесса излучения. Оба эти аспекта найдутся сейчас вне рамок нашего рассмотрения, так как они по существу не нужны для понимания эффекта Мессбауэра. Мы будем рассматривать только движения ядра как целого (т. е. движение его центра масс).

Пусть «кет-вектор»  $|i\rangle$  описывает начальное состояние движения ядра до излучения им  $\gamma$ -кванта, а «кет-вектор»  $|f\rangle$  описывает конечное состояние движения этого ядра после излучения им  $\gamma$ -кванта. Предположим, что эти два состояния связаны друг с другом в полном соответствии с законами сохранения энергии и импульса. Детали процесса излучения  $\gamma$ -кванта мы рассматривать не будем. Предположим далее, что ядро первоначально двигалось как свободная частица и, следовательно, его состояние описывалось плоской волной с волновым вектором  $k'$ :

$$|i\rangle = |k'\rangle. \quad (2.5)$$

После излучения  $\gamma$ -кванта с волновым вектором  $k$  и импульсом  $\hbar k$  импульс нашего ядра  $\hbar k'$ , согласно закону сохранения импульса, должен измениться и стать равным  $\hbar(k' - k)$ . Таким образом, конечное состояние движения ядра будет описываться плоской волной с волновым вектором  $k' - k$ :

$$|f\rangle = |k' - k\rangle. \quad (2.6)$$

Гамильтониан, описывающий движение центра масс ядра, просто совпадает с оператором кинетической энергии

$$H = \frac{p^2}{2M}, \quad (2.7)$$

где вектор  $p$  — оператор импульса. И начальное состояние  $|i\rangle$ , и конечное состояние  $|f\rangle$  являются собственными состояниями этого гамильтониана:

$$H|i\rangle = E_i|i\rangle, \quad (2.8a)$$

$$H|f\rangle = E_f|f\rangle. \quad (2.8b)$$

Соответствующие собственные значения совпадают с кинетическими энергиями начального и конечного состояний:

$$E_i = \frac{\hbar^2 k'^2}{2M}, \quad (2.9a)$$

$$E_f = \frac{\hbar^2 (k' - k)^2}{2M} = E_i - \frac{\hbar^2 k' \cdot k}{M} + R. \quad (2.9b)$$

Здесь мы использовали формулу (2.2). Из закона сохранения энергии получаем

$$E_\gamma = E_0 + E_i - E_f = E_0 - R + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}}{M}. \quad (2.10a)$$

Эта формула является обобщением формулы (2.1) на случай, когда ядро не покоится, а имеет начальный импульс  $\hbar \mathbf{k}' \neq 0$ . Хотя выше мы использовали математический формализм квантовой механики, формулу (2.10) можно было получить и в классической механике, так как она — следствие только законов сохранения энергии и импульса.

Аналогичное рассуждение для процесса поглощения  $\gamma$ -кванта ядром с начальным импульсом  $\hbar \mathbf{k}'$  показывает, что этот процесс произойдет, если только  $\gamma$ -квант имеет энергию

$$E_\gamma (\text{погл.}) = E_0 + R - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}}{M}. \quad (2.10b)$$

Из формулы (2.10a) следует, что энергия испущенного  $\gamma$ -кванта зависит от начального импульса ядра. Так как  $\hbar \mathbf{k}'/M = \mathbf{v}_i$  — начальная скорость ядра, то можно написать

$$E_f = E_0 + R - \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i, \quad (2.11a)$$

$$E_\gamma = E_0 - R + \hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i = E_0 - R + E_\gamma \frac{\mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{k}}}{c}, \quad (2.11b)$$

где  $\hat{\mathbf{k}}$  — единичный вектор в направлении  $\mathbf{k}$ . Из формулы (2.11b) видим, что зависимость энергии испущенного  $\gamma$ -кванта (а следовательно, и его частоты) от начальной скорости ядра имеет в точности тот же вид, как в классическом эффекте Доплера для сдвига частоты волны, излучаемой источником, движущимся со скоростью  $\mathbf{v}_i$ . Может показаться странным, что этот результат нами получен при рассуждениях, в которых  $\gamma$ -квант рассматривался как частица, обладающая энергией и импульсом, и в которых формулы (2.11) были выведены из чисто кинематических формул, описывающих законы сохранения энергии и импульса. Однако ничего странного в этом нет. Совпадение результатов различных подходов просто служит хорошим примером корпускулярно-волнового дуализма и той взаимосвязи, которая имеется между волновыми и корпускулярными свойствами фотона.

Чтобы сравнить значения энергий  $\gamma$ -квантов, получаемых из формул (2.10) и (2.11), с экспериментальными значениями, заметим, что соответствующий эксперимент всегда проводится с большим числом ядер, причем регистрируется большое число  $\gamma$ -квантов. Начальные скорости  $\mathbf{v}_i$  разных ядер различны. Если ядра представляют собой классический газ, находящийся в термодинамически равновесном состоянии при определенной температуре, то

они имеют максвелловское распределение по скоростям. Энергия испущенных  $\gamma$ -квантов будет тогда иметь не одно значение, а непрерывный спектр значений, связанный посредством формул (2.11) с максвелловским распределением скоростей  $v_i$ . Среднее значение и среднеквадратичное значение  $E$  определяются выражениями

$$\langle E_\gamma \rangle = E_0 - R + \left\langle E_\gamma \frac{v_i \cdot \hat{k}}{c} \right\rangle, \quad (2.12a)$$

$$\langle E_\gamma^2 \rangle = \left\langle \left[ E_0 - R + E_\gamma \frac{v_i \cdot \hat{k}}{c} \right]^2 \right\rangle. \quad (2.12b)$$

Если распределение начальных скоростей симметрично, то  $\langle v_i \rangle = 0$  и  $\langle E_\gamma v_i \rangle \approx 0$ ; <sup>1)</sup> поэтому

$$\langle E_\gamma \rangle = E_0 - R, \quad (2.13a)$$

$$\langle E_\gamma^2 \rangle = (E_0 - R)^2 + \langle E_\gamma^2 v_i^2 \rangle / c^2 \approx \langle E_\gamma \rangle^2 \left( 1 + \frac{\langle v_i^2 \rangle}{c^2} \right) \quad (2.13b)$$

и

$$\langle E_\gamma^2 \rangle - \langle E_\gamma \rangle^2 = \langle E_\gamma \rangle^2 \langle v_i^2 \rangle / c^2. \quad (2.13b)$$

Таким образом, центр спектра энергий испускаемых  $\gamma$ -квантов приходится на энергию  $E_0 - R$ , т. е. ту энергию, которую имел бы  $\gamma$ -квант, если бы испускающее его ядро до его испускания находилось в покое. Ширина спектра энергий пропорциональна среднеквадратичному значению начальной скорости ядра. Это в точности так же, как для доплеровского уширения спектральной линии излучающих атомов в газе, которое возникает вследствие теплового движения излучающих атомов.

На фиг. 2.3 показан типичный спектр испускания  $\gamma$ -квантов. Из формулы (2.10б) видно, что соответствующий спектр поглощения совпадает с изображенным на фиг. 2.3, но центр его расположен не в точке  $E_0 - R$ , а в точке  $E_0 + R$ , т. е. он является зеркальным отражением фиг. 2.3 относительно вертикальной прямой  $E_\gamma = E_0$ .

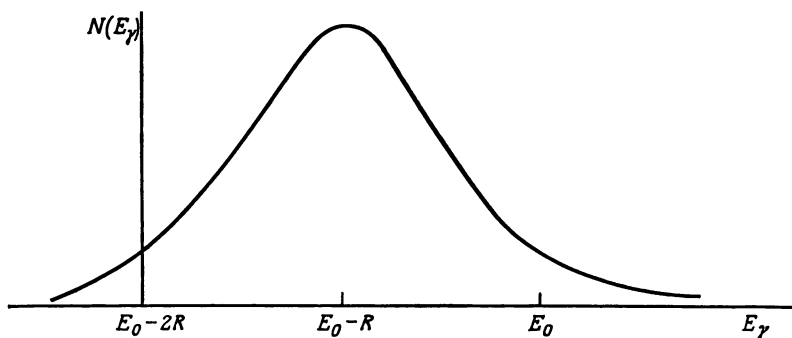
Хотя, разумеется, знать среднее и среднеквадратичное значения энергии  $E$  вполне достаточно для определения общей формы спектра типа изображенного на фиг. 2.3, в случае эффекта Мессбауэра это выглядит иначе. Оказывается, очень существенную роль играют другие, более тонкие особенности спектра. Описать эти особенности можно с помощью высших моментов спектральной функции, определяемых следующей формулой:

$$\langle E_\gamma^m \rangle = \left\langle \left[ E_0 - R + E_\gamma \frac{v_i \cdot \hat{k}}{c} \right]^m \right\rangle. \quad (2.14)$$

<sup>1)</sup> Так как величины  $E_\gamma - \langle E_\gamma \rangle$  и  $v_i/c$  малы, то  $E_\gamma (v_i/c) \approx \langle E_\gamma \rangle (v_i/c)$ .

Используя формулу (2.14), можно выразить моменты спектральной функции  $\gamma$ -квантов через моменты функции распределения начальных скоростей.

Из фиг. 2.3 видно, что если разброс начальных скоростей излучающих ядер велик, то спектр испускания  $\gamma$ -квантов простирается достаточно далеко и включает энергию  $E_0$ . Аналогично ведет себя и спектр поглощения. Поэтому лишь очень небольшие области спектров излучения и резонансного поглощения фактически перекрываются друг с другом. Если источник  $\gamma$ -излучения



Фиг. 2.3.

находится в тепловом равновесии, то ширина распределения будет определяться только температурой источника. Повышение температуры приводит к расплыванию распределения и увеличению резонансного поглощения, и, напротив, понижение температуры должно вести к уменьшению этого поглощения. В ранних экспериментах по ядерному резонансному поглощению, производимых до Мессбауэра, этот температурный эффект использовался для обнаружения резонансного поглощения по его температурной зависимости. Первоначальный эксперимент Мессбауэра был именно такого типа. Однако Мессбауэр обнаружил, что понижение температуры ведет не к уменьшению, а к увеличению поглощения <sup>1)</sup>.

До Мессбауэра также проводились эксперименты, в которых вероятность резонансного поглощения увеличивали, сообщая источнику  $\gamma$ -излучения механическое движение и тем самым  $\gamma$ -квантам доплеровский сдвиг в нужном направлении. В этом случае  $\langle v_i \rangle \neq 0$ , и, как видно из формулы (2.12а), центральную часть спектра распределения энергий испущенных  $\gamma$ -квантов можно

<sup>1)</sup> Причиной этому служит как раз эффект Мессбауэра, разбираемый в следующем параграфе.

сдвинуть из положения  $E_0 - R$  ближе к  $E_0$ . В случае ядра  $^{57}\text{Fe}$ , рассмотренного выше, для получения доплеровского сдвига порядка  $R$  требуются скорости порядка  $cR/E_0 \approx 4 \cdot 10^3$  см/с. Такие скорости получались при использовании вращающихся дисков и центрифуг.

Но во всех этих случаях область спектра с нужной нам энергией и вероятность резонансного поглощения были чрезвычайно малыми.

### § 3. Излучение связанным ядром. Эффект Мессбауэра

Мессбауэр экспериментально обнаружил, что спектр испущенных  $\gamma$ -квантов ядром, связанным в кристалле, может сильно отличаться от спектра, изображенного на фиг. 2.3. При определенных условиях имеется весьма заметная вероятность испускания  $\gamma$ -кванта с полной энергией  $E_0$  и последующего поглощения его без каких-либо потерь на энергию отдачи ядра. Следовательно, резонансное поглощение может легко наблюдаться. Чтобы понять суть эффекта Мессбауэра, ниже мы рассмотрим очень простую модель, в которой ядро не свободно, а совершает одномерное движение под действием потенциала гармонического осциллятора. Конечно, эта модель не совсем точно описывает движение атома в кристалле; в кристалле силы, действующие на атом, обусловлены взаимодействием этого атома с соседними атомами. Однако все же эта простая модель ядра, движущегося во внешнем гармоническом потенциале, хорошо передает все основные черты эффекта Мессбауэра.

Гамильтониан, описывающий движение ядра в одномерном гармоническом осцилляторном потенциале, имеет следующий вид:

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega^2 x^2, \quad (2.15)$$

где  $\omega/2\pi$  — частота осциллятора. Собственные состояния этого гамильтониана характеризуются квантовыми числами  $n$ . Его собственные значения равны  $(n + 1/2) \hbar\omega$ , так что

$$H |n'\rangle = \left(n' + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega |n'\rangle = E_{n'} |n'\rangle. \quad (2.16)$$

Будем считать, что до излучения  $\gamma$ -кванта ядро находится в каком-то одном определенном собственном состоянии гармонического осциллятора:

$$|i\rangle = |n'\rangle. \quad (2.17)$$

Так как это состояние не является собственным состоянием оператора импульса ядра  $p$ , то мы не можем сразу указать вид вектора конечного состояния, т. е. непосредственно применить закон сохранения импульса. Однако мы знаем, что набор плоских волн, описывающих собственные состояния оператора импульса, образует полную ортонормированную систему. Поэтому мы можем разложить вектор начального состояния  $|i\rangle$  по плоским волнам. В прединтергеровском, координатном, представлении это разложение совпадает с формулой преобразования Фурье для соответствующей волновой функции осциллятора. В обозначениях Дирака получаем

$$|i\rangle = \sum_{k'} |k'\rangle \langle k'|i\rangle. \quad (2.18)$$

Теперь допустим, что закон сохранения импульса можно применить отдельно к каждой из плоских волн  $|k'\rangle$  и таким образом определить вид вектора конечного состояния ядра после излучения  $\gamma$ -кванта<sup>1)</sup>. Волновой вектор  $k'$  каждой плоской волны изменится на величину  $k$ , и волна  $|k'\rangle$  превратится в волну  $|k' - k\rangle$ . Таким образом, вектор конечного состояния примет вид

$$|f\rangle = \sum_{k'} |k' - k\rangle \langle k'|i\rangle. \quad (2.19)$$

Непосредственно провести суммирование по  $k'$  в формуле (2.19) довольно сложно. Но сумму (2.19) можно упростить, зная, что оператор  $e^{-ikx}$ , действуя на плоскую волну, оставляет ее плоской и только изменяет ее волновой вектор на величину  $-k$ :

$$e^{-ikx} |k'\rangle = |k' - k\rangle. \quad (2.20)$$

Используя формулу (2.20), можно переписать соотношение (2.19) в виде

$$|f\rangle = \sum_{k'} e^{-ikx} |k'\rangle \langle k'|i\rangle. \quad (2.21)$$

Суммирование по  $k'$  можно теперь легко провести с помощью условия полноты; в результате имеем

$$|f\rangle = e^{-ikx} |i\rangle. \quad (2.22)$$

Получив эту простую формулу для конечного состояния ядра, мы можем, используя закон сохранения энергии, найти спектр энергий  $\gamma$ -квантов, испущенных связанным ядром. В отличие от случая свободного ядра конечное состояние (2.22) не является

<sup>1)</sup> Это допущение означает, что передача импульса происходит в одном мгновенном акте взаимодействия, а не в серии многих актов мелкими порциями. Сейчас мы не будем отвлекаться и обсуждать вопрос о законности этого допущения.



собственным состоянием гамильтониана (2.15) и поэтому не обладает определенной энергией. Это означает, что мы не можем заранее предсказать, какова будет энергия  $\gamma$ -кванта, а можем сделать лишь вероятностное высказывание. Мы можем предсказать только форму спектра энергий  $\gamma$ -квантов, испущенных большим числом ядер, относительно которых известно, что первоначально все они находились в состоянии  $|i\rangle$ .

Разложим вектор конечного состояния  $|f\rangle$  по полному набору ортонормированных собственных состояний  $|n'\rangle$  гамильтониана  $H$ :

$$|f\rangle = \sum_{n''} |n''\rangle \langle n''|f\rangle, \quad (2.23a)$$

$$= \sum_{n''} |n''\rangle \langle n''|e^{-i\hbar x}|i\rangle, \quad (2.23б)$$

$$= \sum_{n''} |n''\rangle \langle n''|e^{-i\hbar x}|n'\rangle; \quad (2.23в)$$

здесь мы использовали формулы (2.22) и (2.17). Вероятность обнаружить ядро (после излучения  $\gamma$ -кванта) в состоянии  $|n''\rangle$  с энергией  $E_{n''} = \left(n'' + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$  дается квадратом соответствующего коэффициента в разложении (2.23). Обозначим через  $p_{n' \rightarrow n''}$  вероятность того, что ядро, находившееся первоначально в состоянии  $|n'\rangle$ , перейдет после излучения  $\gamma$ -кванта в состояние  $|n''\rangle$ . Запишем эту вероятность в виде

$$P_{n' \rightarrow n''} = |\langle n''|e^{-i\hbar x}|n'\rangle|^2. \quad (2.24)$$

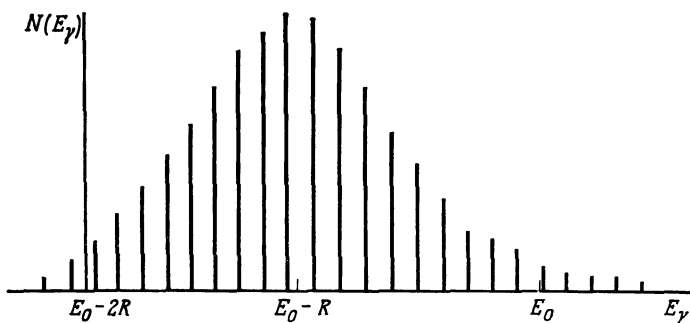
Энергию  $\gamma$ -кванта можно определить из закона сохранения энергии. Если ядро после излучения окажется в состоянии  $|n''\rangle$ , то

$$E_\gamma = E_0 - \hbar\omega (n'' - n'). \quad (2.25)$$

Между спектром энергий излученных  $\gamma$ -квантов для разбираемого случая связанного ядра и спектром, изображенным на фиг. 2.3, имеется одно очевидное различие. Теперь спектр энергий  $\gamma$ -квантов не непрерывен, а дискретен, так как дискретны уровни энергии гармонического осциллятора. Энергия  $\gamma$ -кванта может отличаться от  $E_0$  только на целое число квантов энергии осциллятора (с неопределенностью порядка ширины линии, которая, однако, очень мала). Следовательно, спектр энергий  $\gamma$ -квантов состоит из набора острых пиков, интенсивность каждого из которых определяется величиной соответствующей вероятности перехода  $P_{n' \rightarrow n''}$ .

В случае когда ядро связано очень слабо, следует ожидать, что спектр энергий испущенных им  $\gamma$ -квантов будет приближаться по форме к спектру свободного ядра, изображенному на фиг. 2.3.

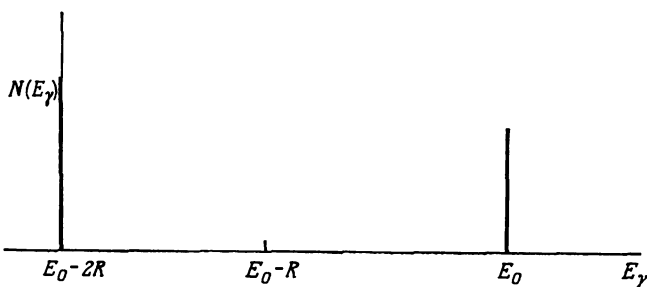
При слабой связи частота осциллятора будет малой и можно ожидать, что спектр энергий  $\gamma$ -квантов будет состоять из большого числа близко расположенных пиков, огибающая которых при-



Фиг. 2.4.

близительно совпадает с кривой на фиг. 2.3. Такого рода спектр изображен на фиг. 2.4.

Большой интерес представляет случай сильной связи. Предположим, например, что  $\hbar\omega = 2R$ . В этом случае пики в спектре будут соответствовать точкам  $E_0$ ,  $E_0 \pm 2R$  и другим более уда-



Фиг. 2.5.

ленным точкам, как показано на фиг. 2.5. В таком спектре нет пиков, приходящихся на энергии  $\gamma$ -квантов в интервале от  $E_0 - 2R$  до  $E_0$ , т. е. как раз в том интервале, на который падает основная часть спектра в случае слабой связи или при отсутствии связи. Поэтому можно ожидать, что вероятность излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_0$ , необходимой для резонансного поглощения, будет в этом случае значительна. Так оно в действительности и есть.

Из формулы (2.25) видно, что для выполнения условия резонансного поглощения ( $E_\gamma = E_0$ ) должно иметь место равенство  $n'' = n'$ . Другими словами,  $\gamma$ -квант будет уносить всю энергию перехода в том случае, если энергия движения ядра до и после перехода одинакова. Вероятность излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_0$  дается тогда формулой (2.24), в которой надо положить  $n'' = n'$ .

Явления резонансного поглощения такого рода были известны задолго до открытия эффекта Мессбауэра, хотя их связь с процессом передачи импульса не была понята. При обычном рассеянии рентгеновских квантов на кристалле рассеянный квант выходит из кристалла в направлении, составляющем некоторый угол с падающим. Так как квант обладает импульсом, то при этом должна происходить передача импульса кристаллу. Кристалл состоит из множества движущихся атомов и, грубо говоря, подобен некоторой системе из большого числа гармонических осцилляторов. Когда мы имеем дело с дифракцией рентгеновских квантов, все выходящие из кристалла рассеянные кванты имеют одну и ту же длину волны. Следовательно, они должны обладать той же энергией, что и падающий квант. Это означает, что система гармонических осцилляторов, моделирующих кристалл, должна после акта рассеяния рентгеновского кванта оставаться в том же состоянии, в котором была до рассеяния, хотя она и поглотила импульс, потребовавшийся для изменения направления рентгеновского кванта. Вероятность такого процесса описывается формулой, очень похожей на нашу формулу (2.24), только вместо состояний одного осциллятора в нее входят состояния всего кристалла. Взаимосвязь этого результата с актом передачи импульса не была понята до открытия эффекта Мессбауэра потому, что формула для дифракции рентгеновских лучей, аналогичная формуле (2.24), была выведена на основе классической волновой теории рентгеновского излучения, а не на основе корпускулярной теории квантового излучения, которую мы использовали выше, когда применяли закон сохранения импульса. Тот факт, что один и тот же результат можно вывести в рамках обеих, столь различных с первого взгляда теорий, является наглядным проявлением корпускулярно-волнового дуализма фотона. Подробнее мы остановимся на этом вопросе ниже, когда раскроем формулу (2.24) в частном случае одномерного осциллятора.

#### § 4. Расчет спектра $\gamma$ -квантов

Расчет по формуле (2.24) можно провести либо с помощью матричного метода, либо путем простого интегрирования. Мы используем второй способ. Фактически нам нужно вычислить матричные элементы оператора  $e^{-ikx}$ , взятые между собственными состояниями гармонического осциллятора. Ниже все вычисления мы будем

проводить в координатном представлении. Обозначим через  $\psi_{n'}(x)$  и  $\psi_{n''}(x)$  нормированные волновые функции состояний  $n'$  и  $n''$  гармонического осциллятора. Тогда формулу (2.24) можно записать в следующем виде:

$$P_{n' \rightarrow n''} = \left| \int \psi_{n''}^*(x) e^{-ikx} \psi_{n'}(x) dx \right|^2. \quad (2.26)$$

Вероятность того, что излученный ядром  $\gamma$ -квант будет иметь энергию  $E_0$ , дается этой формулой, если в нее подставить  $n'' = n'$ . Так как произведение

$$\rho_{n'}(x) = \psi_{n'}^*(x) \psi_{n'}(x) \quad (2.27)$$

в точности представляет собой плотность вероятности найти ядро в пространственной точке  $x$  в состоянии  $n'$  гармонического осциллятора, то (2.26) можно записать в виде

$$P_{n' \rightarrow n''} = \left| \int \rho_{n'}(x) e^{-ikx} dx \right|^2. \quad (2.28)$$

Формула (2.28) в свою очередь показывает, что искомая вероятность равна в точности квадрату  $k$ -й компоненты фурье-образа функции плотности вероятности  $\rho_{n'}(x)$ . Следует заметить, что этот результат общий и никак не зависит от конкретных свойств собственных функций гармонического осциллятора. При выводе формулы (2.28) мы использовали квантовые числа  $n'$ ,  $n''$  только для обозначения собственных состояний гамильтониана и нигде не пользовались явным видом самого гамильтониана, а именно что он — гамильтониан гармонического осциллятора.

Формула (2.28) хорошо известна в теории рассеяния рентгеновских лучей на кристаллах. Интенсивность рассеянного кристаллом пучка рентгеновских лучей является мерой величины фурье-образа электронной плотности. (Именно *электронной* плотности, так как рентгеновские лучи взаимодействуют с электронами, а не с ядрами.) Значение  $k$  можно варьировать от эксперимента к эксперименту, изменяя энергию падающего пучка рентгеновских лучей и угол рассеяния, что позволяет определить абсолютную величину (но не фазу) фурье-образа электронной плотности для целого интервала значений  $k$ .

Формулу (2.28) можно получить также в классической волновой теории. Волновую функцию  $\psi_{n'}(x)$ , описывающую движение рассеивающей частицы, надо теперь считать стоячей волной. Эту стоячую волну следует рассматривать как протяженный источник  $\gamma$ -излучения, которое само следует описывать классическими волнами. Полную амплитуду излучения всего источника можно получить просто, суммируя амплитуды излучений от малых участков этого источника. Если размеры источника сравнимы с длиной волны испускаемого  $\gamma$ -излучения, то эти вклады от раз-

личных участков источника не будут совпадать по фазе. Между ними будут разности фаз, зависящие от длины пройденного волновой пути. Вклад в полную амплитуду от участка, расположенного в окрестности точки  $x$ , пропорционален значению функции плотности источника  $\rho_{n'}(x)$  в этой точке, а фаза вклада равна  $e^{-ikx}$ . Поэтому суммирование вкладов от всех участков дает интеграл, в точности совпадающий с интегралом в формуле (2.28).

Мы вывели формулу (2.28) на основе очень общих предположений, которые оправдываются во многих ситуациях, непосредственно и не связанных с эффектом Мессбауэра. Фактически мы предположили только, что имеется некоторый акт передачи импульса  $\hbar k$  частице, находящейся в каком-то своем связанном состоянии, и что вероятность перехода частицы при этом акте передачи (из начального связанного состояния в некоторое конечное связанное состояние) можно найти, разложив начальное и конечное состояния по плоским волнам и применив закон сохранения импульса к данному переходу. С подобной передачей импульса связанной частице приходится сталкиваться во многих задачах теоретической физики, причем сам акт передачи импульса можно описывать всегда одинаково. Величина, входящая в правую часть формулы (2.28), называется «формфактором» или «структурным фактором», так как она определяется формой или структурой волновой функции связанного состояния. Измерение формфактора очень часто является конечной целью экспериментов по изучению свойств связанной системы. Примером могут служить эксперименты по рассеянию высокоэнергетических электронов, которые проводят с целью определить распределение электрического заряда в ядрах, в протоне и в нейтроне.

Когда передаваемый импульс  $k$  мал, можно в формуле (2.28) разложить экспоненту по степеням  $k$ . Если считать, что распределение плотности  $\rho_{n'}(x)$  симметрично относительно начала координат, то члены с нечетными степенями  $kx$  в разложении исчезнут. Поэтому первым нетривиальным членом будет квадратичный член. Ограничиваясь членами до второго порядка, получаем

$$P_{n' \rightarrow n''} \approx \left| \int \rho_{n'}(x) \left[ 1 - \frac{1}{2} k^2 x^2 \right] dx \right|^2 \approx 1 - k^2 \langle x^2 \rangle_{n'}, \quad (2.29)$$

где

$$\langle x^2 \rangle_{n'} = \int \rho_{n'}(x) x^2 dx. \quad (2.30)$$

Последняя величина есть не что иное, как квадрат среднеквадратичного отклонения частицы от положения равновесия, или квадрат среднеквадратичного радиуса ее волновой функции. Таким образом, формфактор при малых значениях передаваемого импульса характеризуется среднеквадратичным радиусом системы.

В экспериментах по рассеянию электронов высоких энергий это обстоятельство позволило в свое время определить среднеквадратичные радиусы распределения электрического заряда в ядрах.

При больших  $k$  величина в правой части формулы (2.28) начинает зависеть не только от среднеквадратичного радиуса, но и от других величин, характеризующих форму функции плотности  $\rho_n(x)$ . Если до испускания  $\gamma$ -кванта частица находилась в основном состоянии потенциала гармонического осциллятора, то ее волновая функция  $\psi_0(x)$  имеет гауссову форму, и, следовательно,

$$\rho_0(x) = Ne^{-\alpha x^2}, \quad (2.31a)$$

где  $N$  и  $\alpha$  — константы, являющиеся функциями величин  $M$  и  $\omega$ , входящих в гамильтониан осциллятора. Для эффекта Мессбауэра оказывается тем не менее, что практически всегда функция плотности  $\rho_n(x)$  имеет с очень хорошей степенью точности гауссову форму. Поэтому на основе формулы (2.31a) можно получить результаты, которые справедливы, вообще говоря, и в тех случаях, когда частица не находится первоначально в основном состоянии гармонического осциллятора.

С функцией плотности (2.31a) интеграл в правой части формулы (2.28) легко вычислить. Впрочем, мы можем получить окончательный результат, вообще не производя никаких расчетов, если только вспомним, что фурье-образ функции Гаусса — это тоже функция Гаусса, и если учтем, что наш окончательный результат с точностью до членов второго порядка малости по  $k$  должен совпадать с приближенным результатом (2.29). Таким образом, сразу получаем

$$P_{0 \rightarrow 0} = e^{-k^2 \langle x^2 \rangle_0}. \quad (2.31b)$$

Формула (2.31b) давно известна в теории дифракции рентгеновских лучей на кристаллах, и ее правую часть обычно называют «фактором Дебая — Валлера». В этой теории данная формула была выведена на основе классической волновой теории с помощью рассуждений, полностью аналогичных приведенным выше.

Формула (2.31b) позволяет найти вероятность излучения распадающейся частицей  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_0$ , необходимой для резонансного поглощения другой частицей, когда первоначально и та и другая частицы находились в основном состоянии гармонического осциллятора. Однако, как уже отмечалось выше, формула (2.31b) имеет значительно более широкую область применения и справедлива во всех случаях, когда функция  $\rho(x)$  имеет гауссову форму. Можно даже считать, что эта формула для вероятности излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_0$  справедлива почти всегда.

### § 5. Различные формулы для фактора Дебая — Валлера и их интерпретация

Формулу (2.31б) можно преобразовать к другому виду, используя хорошо известное свойство гармонического осциллятора: среднее значение кинетической энергии для гармонического осциллятора равно среднему значению потенциальной энергии, причем обе эти величины равны половине полной энергии осциллятора. Так как полная энергия для основного состояния осциллятора равна  $\frac{1}{2} \hbar \omega$ , то мы имеем следующие формулы:

$$\frac{1}{2} M \omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2M} = \frac{1}{4} \hbar \omega, \quad (2.32a)$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2M\omega} = \frac{\hbar^2}{2M(\hbar\omega)}, \quad (2.32б)$$

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2. \quad (2.32в)$$

Формула (2.32в) выражает хорошо известное свойство основного состояния гармонического осциллятора, а именно тот факт, что гейзенберговское соотношение неопределенностей для импульса и координаты обращается для этого состояния в точное равенство. Подставляя (2.32б) и (2.32в) в (2.31б), получаем две следующие формулы для фактора Дебая — Валлера:

$$P_{0 \rightarrow 0} = e^{-\hbar^2 k^2 / 2M\hbar\omega} = e^{-R/\hbar\omega}, \quad (2.33a)$$

$$P_{0 \rightarrow 0} e^{-\hbar^2 k^2 / 4 \langle p^2 \rangle}. \quad (2.33б)$$

Трем формулам (2.31б), (2.33a) и (2.33б) для одной и той же величины можно дать *различные качественные физические интерпретации*, которые, как это характерно для квантовой механики, взаимно дополняют друг друга.

Рассмотрим формулу (2.31б). Интерпретировать ее очень просто в рамках волновой теории. Интенсивность  $\gamma$ -излучения велика тогда, когда величина  $k^2 \langle x^2 \rangle = (2\pi)^2 \langle x^2 \rangle / \lambda^2$  мала, т. е. в том случае, если протяженность источника  $\gamma$ -лучей мала по сравнению с длиной волны  $\lambda$ -излучения, так что волны от различных участков источника не сдвинуты по фазе друг относительно друга.

Формулу (2.33a) легко интерпретировать, обратившись к спектру, изображенному на фиг. 2.5. Из этой формулы следует, что интенсивность  $\gamma$ -лучей, имеющих энергию  $E = E_0$ , не мала только в том случае, если  $\hbar\omega$  не мало по сравнению с  $R$ . Другими словами, чтобы она не была малой, расстояние между уровнями энергии осциллятора должно быть порядка величины энергии отдачи свободного ядра или больше. Это характерно для ситуации, изобра-

женной на фиг. 2.5, когда интенсивность спектра в точке  $E_0$  оказывается большой по той причине, что полная интенсивность в спектре должна быть распределена между немногими изолированными пиками, энергетическое расстояние между которыми велико по сравнению с энергией отдачи  $R$  свободного ядра. Когда кинетическая энергия отдачи  $R$  недостаточна для квантового перехода с одного осцилляторного уровня на следующий, тогда будет велика вероятность того, что частица останется на своей прежней орбите и перехода не произойдет.

Из формулы (2.33б) непосредственно следует, что число  $\gamma$ -квантов с энергией  $E_0$  будет значительным только при том условии, если импульс  $\hbar k$  каждого такого  $\gamma$ -кванта будет мал по сравнению с флуктуациями импульса излучающей частицы в ее начальном состоянии, т. е. если  $(\hbar k)^2 < 4 \langle p^2 \rangle$ . Вероятность того, что частица поглотит импульс  $\gamma$ -кванта, не изменив своего квантового состояния, велика только тогда, когда импульс  $\gamma$ -кванта по порядку величины такой же, как и флуктуации импульса при нулевых колебаниях частицы, движущейся в потенциале осциллятора.

Хотя эти три интерпретации формулы для фактора Дебая — Валлера кажутся совершенно различными, они на самом деле тесно связаны друг с другом, что легко видеть, если воспользоваться квантовомеханическими принципами неопределенности, дополненности и концепцией корпускулярно-волнового дуализма. Формулу (2.31б) выше мы интерпретировали в рамках классической волновой теории, используя характерные для этой теории понятия длины волны, фазы и интерференции. Формулу (2.33б) мы интерпретировали в рамках корпускулярной теории, используя понятия импульса  $\gamma$ -кванта и импульса излучающей частицы и рассматривая флуктуации ее импульса. Обе интерпретации дополняют друг друга, а их взаимосвязь можно непосредственно установить на основе принципа неопределенности [который и был фактически уже использован нами в виде формулы (2.32в); последняя применялась для вывода формулы (2.33б) из формулы (2.31б)]. Если в рамках волновой теории мы говорим, что излучающая частица должна быть локализована в области пространства, размеры которой малы по сравнению с длиной волны  $\gamma$ -излучения, то в рамках корпускулярной теории мы должны сказать, согласно принципу неопределенности, что неопределенность импульса излучающей частицы должна быть велика по сравнению с импульсом  $\gamma$ -кванта. Таким образом, эти два утверждения — не что иное, как различные способы выражения одного и того же.

Формула (2.33а) записана с использованием энергетических величин, а не через импульсы или длины волн. Она непосредственно связана с формулой (2.33б), выраженной через импульсные величины, так как энергия отдачи свободного ядра propor-



циональна квадрату импульса  $\gamma$ -кванта, а частота гармонического осциллятора пропорциональна кинетической энергии излучающей частицы, т. е. квадрату ее импульса.

### § 6. Правила сумм и моменты спектральной функции энергетического спектра

Используя операторы, или матрицы, мы легко можем найти выражения для моментов спектральной функции спектра энергий  $\gamma$ -квантов, излученных связанной частицей, и сравнить их с выражениями (2.12) и (2.14) для моментов в случае спектра энергий  $\gamma$ -квантов, излученных свободной частицей. Прежде всего убедимся, что формула (2.24) действительно согласуется с определением вероятности, для чего проверим, что сумма всех вероятностей по всем конечным состояниям  $n''$  равна единице. В самом деле,

$$\begin{aligned} \sum_{n''} P_{n' \rightarrow n''} &= \sum_{n''} \langle n' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} | n'' \rangle \langle n'' | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} | n' \rangle = \\ &= \langle n' | e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \cdot e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} | n' \rangle = 1. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Здесь суммирование по  $n''$  легко проводится путем использования условия полноты.

Моменты спектральной функции спектра энергий  $\gamma$ -квантов можно найти, вычислив предварительно моменты спектральной функции спектра энергий  $E_f$  конечных состояний  $|f\rangle$  частицы, движущейся в потенциале осциллятора. Так как энергия  $\gamma$ -кванта и энергия конечного состояния излучающей частицы связаны законом сохранения

$$E_\gamma - E_0 + E_f - E_{n'}, \quad (2.35)$$

в котором  $E_0$  и  $E_{n'}$  фиксированы, то между моментами спектральных функций спектров энергий  $E_\gamma$  и  $E_f$  существует простая взаимосвязь.

Моменты спектральной функции спектра энергий конечных состояний  $|f\rangle$  — это просто диагональные матричные элементы различных степеней гамильтониана, взятые для конечного состояния  $f$ . Используя формулу (2.22), получаем

$$\langle E_f^m \rangle = \langle f | H^m | f \rangle = \langle i | e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} H^m e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} | i \rangle; \quad (2.36a)$$

учитывая соотношение (2.35) и то, что  $E_0$  и  $E_{n'}$  фиксированы, приходим к следующей формуле:

$$\begin{aligned} \langle E_\gamma^m \rangle &= \langle f | (E_0 - H + E_{n'})^m | f \rangle = \\ &= \langle i | e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} (E_0 - H + E_{n'})^m e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} | i \rangle. \end{aligned} \quad (2.36b)$$

Прежде чем проводить расчеты по формулам (2.36), заметим, что оператор  $e^{-ikx}$  очевидным образом унитарен, так как оператор  $kx$  эрмитов. Формулу (2.22) для векторов начального и конечного состояний можно рассматривать как унитарное преобразование. Среднее значение любого оператора по конечному состоянию  $|f\rangle$  равно среднему значению от соответствующего преобразованного оператора по начальному состоянию  $|i\rangle$ . Формулы (2.36) как раз и выражают это унитарное преобразование. Среднее значение  $E_f^m$  по конечному состоянию можно вычислить, взяв либо среднее значение от оператора  $H^m$  по конечному состоянию, либо среднее значение от преобразованного оператора  $e^{ikx}H^m e^{-ikx}$  по начальному состоянию. Вычисление по формулам (2.36) можно упростить, если воспользоваться следующими простыми свойствами рассматриваемого унитарного преобразования:

1. Так как оператор  $e^{ikx}$  зависит только от переменной  $x$ , он коммутирует с любой функцией от  $x$ . Следовательно, любая функция от  $x$  не меняется при преобразовании, и мы имеем

$$e^{ikx}f(x)e^{-ikx} = f(x). \quad (2.37)$$

2. Преобразование оператора  $p$  с помощью оператора  $e^{ikx}$  легко провести непосредственно, так как

$$\begin{aligned} e^{ikx}pe^{-ikx} &= e^{ikx}\{e^{-ikx}p + [p, e^{-ikx}]\} = \\ &= e^{ikx}\left\{e^{-ikx}p + \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(e^{-ikx})\right\} = \\ &= e^{ikx}\{e^{-ikx}p - \hbar ke^{-ikx}\} = p - \hbar k. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Отсюда сразу следует, что преобразование любой степени оператора  $p$  можно произвести по формуле

$$e^{ikx}p^m e^{-ikx} = (e^{ikx}pe^{-ikx})^m = (p - \hbar k)^m. \quad (2.39)$$

Преобразование гамильтониана (2.15) выполняется следующим образом:

$$e^{ikx}He^{-ikx} = \frac{(p - \hbar k)^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2}x^2 = H - \frac{\hbar kp}{M} + R. \quad (2.40)$$

Преобразование любой степени гамильтониана (2.15) имеет вид

$$e^{ikx}H^m e^{-ikx} = (e^{ikx}He^{-ikx})^m = \left(H - \frac{\hbar kp}{M} + R\right)^m. \quad (2.41a)$$

Учитывая, что  $E_0$  и  $E_{n'}$  фиксированы, приходим к формуле

$$e^{ikx}(E_0 - H + E_{n'})^m e^{-ikx} = \left(E_0 - H + E_{n'} + \frac{\hbar kp}{M} - R\right)^m. \quad (2.41b)$$

Подставляя (2.41) в (2.36), получаем

$$\langle E_f^m \rangle = \langle i | \left( H - \frac{\hbar k p}{M} + R \right)^m | i \rangle, \quad (2.42a)$$

$$\langle E_\gamma^m \rangle = \langle i | \left( E_0 - H + E_{n'} + \frac{\hbar k p}{M} - R \right)^m | i \rangle. \quad (2.42b)$$

Так как начальное состояние  $|i\rangle$  является собственной функцией гамильтониана  $H$  с собственным значением, которое можно обозначить через  $E_i = E_{n'}$ , то из формулы (2.42) непосредственно легко получить выражения для первого и второго моментов ( $m = 1$  и  $m = 2$ ). Оператор  $H$ , действуя на состояние  $|i\rangle$  и слева и справа, дает собственное значение  $E_i$ , и, следовательно,

$$\langle E_f \rangle = E_i + R - \frac{\hbar k}{M} \langle i | p | i \rangle, \quad (2.43a)$$

$$\langle E_f^2 \rangle = \langle i | \left( E_i + R - \frac{\hbar k p}{M} \right)^2 | i \rangle, \quad (2.43b)$$

$$\langle E_\gamma \rangle = E_0 - R + \frac{\hbar k}{M} \langle i | p | i \rangle, \quad (2.43b)$$

$$\langle E_\gamma^2 \rangle = \langle i | \left( E_0 - R + \frac{\hbar k p}{M} \right)^2 | i \rangle. \quad (2.43r)$$

При  $m > 2$  имеем формулы

$$\begin{aligned} \langle E_f^m \rangle = \langle i | \left( E_i - \frac{\hbar k p}{M} + R \right) \left( H - \frac{\hbar k p}{M} + R \right)^{m-2} \times \\ \times \left( E_i - \frac{\hbar k p}{M} + R \right) | i \rangle, \end{aligned} \quad (2.44a)$$

$$\begin{aligned} \langle E_\gamma^m \rangle = \langle i | \left( E_0 - R + \frac{\hbar k p}{M} \right) \left( E_0 - H + E_i + \frac{\hbar k p}{M} - R \right)^{m-2} \times \\ \times \left( E_0 - R + \frac{\hbar k p}{M} \right) | i \rangle. \end{aligned} \quad (2.44b)$$

Дальнейшее упрощение этих формул не так просто произвести, так как оставшиеся в (2.44) операторы  $H$  не действуют непосредственно на начальное состояние  $|i\rangle$ . Оператор  $H$  не коммутирует с оператором  $p$ , и пронести его через этот последний оператор [так, чтобы он подействовал на состояние  $|i\rangle$ ], можно только ценой введения дополнительных членов, содержащих коммутаторы операторов  $H$  и  $p$ . Мы будем иметь формулу

$$\langle E_\gamma^m \rangle = \langle i | \left( E_0 - R + \frac{\hbar k p}{M} \right)^m | i \rangle + \text{члены, содержащие коммутаторы.} \quad (2.45)$$

Сравним теперь наши формулы (2.42) — (2.45) с соответствующими формулами для спектра энергий  $\gamma$ -квантов в случае свободного ядра, а именно с формулами (2.12) и (2.14). Оператор  $p/M$ , дейст-

вующий на волновую функцию начального состояния  $|i\rangle$ , есть не что иное, как оператор начальной скорости  $v_i$ . Таким образом, единственное различие между формулами для связанного ядра и свободного ядра состоит в наличии в формуле (2.45) членов, содержащих коммутаторы; оно непосредственно связано с некоммутативностью операторов  $H$  и  $p$  в формулах (2.44). Это различие совершенно не сказывается, однако, на первом и втором моментах спектральных функций, которые одинаковы для обоих случаев. Оно сказывается на особенностях формы спектра, которые определяются высшими моментами. Так как члены, содержащие коммутаторы, пропорциональны  $\hbar$ , то они должны исчезать в квазиклассическом пределе  $\hbar \rightarrow 0$ , т. е. в случае, когда ядро первоначально находится в состоянии с высоким квантовым числом и его движение можно приближенно описать в рамках классической механики (иначе говоря, при высоких температурах).

Здесь полезно будет вернуться к спектру, изображенному на фиг. 2.3, и посмотреть, как качественно должна измениться его форма при низких температурах, если учесть вышеприведенные соображения. Заметим прежде всего, что спектр, изображенный на фиг. 2.3, продолжается и в область энергий, больших  $E_0$ . Эта область спектра отвечает случаям, когда  $\gamma$ -квант приобретает добавочную энергию за счет кинетической энергии движения частицы. Такие процессы, разумеется, невозможны, если частица первоначально имела нулевую температуру, т. е. находилась в состоянии движения с наименьшей возможной энергией. Рассуждая чисто классически, это обстоятельство легко объяснить, так как при нулевой температуре энергия частицы равна нулю. Ее импульс и скорость также равны нулю, и, следовательно, отсутствует доплеровское уширение спектральной линии (спектр в этом случае представляет собой  $\delta$ -функцию с пиком при  $E_0$  —  $R$  и, таким образом, не продолжается в область энергий, больших  $E_0$ ). Энергия и импульс частицы равны нулю и в квантовой механике, если мы рассмотрим случай свободной частицы, когда ее движение описывается плоской волной. Тогда самому нижнему по энергии состоянию отвечает плоская волна с нулевым волновым вектором  $k = 0$  и бесконечной длиной волны, что, как и в классической механике, приводит к нулевой скорости и нулевой кинетической энергии частицы. В случае когда частица не свободна, а находится в некотором связанном состоянии в каком-то потенциале, например в потенциале гармонического осциллятора, ее кинетическая энергия в основном состоянии уже не будет больше равна нулю, а будет иметь конечное значение, и мы будем, следовательно, иметь функцию распределения по скоростям из-за наличия нулевых колебаний в основном состоянии.

Наличие этих нулевых колебаний в основном состоянии — характерная особенность связанной квантовомеханической систе-

мы. Хотя частица, участвующая в нулевых колебаниях и способная излучать  $\gamma$ -кванты, представляет собой движущийся источник  $\gamma$ -квантов, этот источник не может проявить доплеровского сдвига частоты или изменения длины волны в обычном классическом смысле. Так как частица уже находится в своем самом нижнем энергетическом состоянии колебательного движения, то *она никак не может уменьшить энергию путем излучения  $\gamma$ -кванта*. Она может только приобрести энергию. Конечно, это противоречит всем классическим представлениям о движении, согласно которым движущаяся частица всегда может излучить  $\gamma$ -квант с энергией, большей  $E_0$ , независимо от того, рассматривается ли при этом фотон в рамках волновой или корпускулярной теории. В обеих теориях результат одинаков: если частица движется с довольно большой скоростью в направлении, в котором испускается фотон, то энергия фотона будет больше в волновой теории из-за эффекта Доплера, а в корпускулярной теории из-за специфического действия кинематики законов сохранения энергии и импульса. Совершенно очевидно, что когда частица участвует в квантовомеханических нулевых колебаниях, то нельзя утверждать, что фотон ею испущен именно *в тот момент времени, когда частица двигалась в направлении излучения фотона*. Такое детализированное описание нулевых колебаний частицы запрещается квантовомеханическим принципом неопределенности; другими словами, оно невозможно из-за проявления волновых свойств *частицы*, которая представляет собой просто стоячую волну, «зажатую» в осцилляторном потенциале. Согласно принципу неопределенности, не может произойти никакое уменьшение энергии этого движения частицы. Величины кинетической и потенциальной энергий частицы определяют флуктуации ее координаты и импульса, а они и так имеют минимальные разрешенные значения принципом неопределенности значения.

Хотя, казалось бы, доплеровский сдвиг и доплеровское уширение спектральной линии для частицы, подверженной нулевым колебаниям, должны быть совсем другими, чем для классически движущейся частицы, из формул (2.43) непосредственно видно, что первый и второй моменты спектральной функции спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов в точности совпадают с первым и вторым моментами спектральной функции спектра излучения в случае классически движущейся частицы, имеющей такое же распределение по скоростям. Возможно, это обстоятельство и помешало физикам-теоретикам открыть эффект Мессбауэра. Ведь если ограничиться вычислением только этих двух моментов спектральной функции и на этом остановиться, то можно действительно прийти к выводу, что спектр источника, находящегося в связанном состоянии и совершающего квантовомеханические нулевые колебания, совпадает со спектром, изображенным на фиг. 2.3.

Он имеет такое же положение максимума и такую же ширину. Однако, располагая только этими данными (без вычисления высших моментов), все же можно было бы заметить, что форма спектра должна быть совершенно другой, так как спектр излучения связанной частицы, находящейся в нижнем энергетическом состоянии, не может распространяться на область энергий, больших  $E_0$ . Действительно, если на фиг. 2.3 просто отбросить часть спектра, расположенную правее точки  $E_0$ , то очевидно, что при этом сразу изменятся первый и второй моменты, так как положение максимума должно сместиться влево, а величина второго момента должна уменьшиться. Чтобы первый и второй моменты все же могли принять первоначальные значения даже и тогда, когда учитывается, что верхняя энергетическая граница спектра равна  $E_0$ , разумеется, необходимо коренным образом изменить форму спектра. Как мы видели, форма спектра действительно существенно изменяется, и это изменение обуславливает эффект Мессбауэра. Происходит перегруппировка довольно большого участка спектра в узкий пик, появляющийся при значении энергии  $E = E_0$ .

В заключение еще раз подчеркнем, что различие между случаями свободной и связанной частиц математически проявляется в форме наличия или отсутствия коммутаторов, о которых шла речь выше в связи с формулами (2.44) и (2.45). При выводе этих формул нам нигде не требовалось знать конкретный вид потенциала, а достаточно было знать только то, что он зависит от  $x$  и не зависит от  $p$ . Формулы (2.44) и (2.45) справедливы для любой формы потенциала при том лишь условии, что имеющиеся силы не зависят от скорости, а начальное состояние  $|i\rangle$  является собственным состоянием гамильтониана. Если считать, что  $H$  есть гамильтониан свободной частицы [см. (2.7)], то легко убедиться, что  $H$  коммутирует с  $p$ , все члены формулы (2.45), содержащие коммутаторы, обращаются в нуль и эта формула в точности совпадает с формулой (2.14).

## § 7. Описание первых экспериментов Мессбауэра

Теперь после всего, что было сказано выше, мы можем разобраться в экспериментальных результатах, первоначально полученных Мессбауэром, и понять, почему в свое время они казались столь непонятными. Полученный им спектр  $\gamma$ -квантов имел форму, промежуточную между спектрами, изображенными на фиг. 2.4 и 2.5, и состоял из двух участков: 1) теплового распределения с максимумом при энергии  $E_0 - R$  и 2) очень острого пика при энергии  $E_0$ . В то время наличие пика Мессбауэр не придавал значения и объяснил эксперимент, обращая внимание только на участок теплового распределения. При комнатных температурах фактор Дебая — Валлера очень мал и пик действительно малый.

Так что если рассматривать одно только тепловое распределение, то получится очень хорошее приближение.

При понижении температуры тепловые флуктуации в движении излучающего ядра уменьшаются. Уменьшение флуктуаций импульса ядра должно было, казалось, приводить к сужению участка теплового распределения около  $E = E_0 - R$ , а доля спектра, приходящаяся на участок в окрестности  $E = E_0$ , уменьшаться. Однако, как мы теперь знаем, уменьшение флуктуаций координаты излучающего ядра приводит к уменьшению квадрата среднеквадратичного радиуса ( $x^2$ ), а следовательно, и к увеличению фактора Дебая — Валлера. Таким образом, интенсивность пика при  $E = E_0$  не уменьшается, а возрастает и становится значительной уже при температурах жидкого азота.

При анализе экспериментов по резонансному поглощению надо одновременно рассматривать и спектр излучения, и спектр поглощения. При одинаковой температуре источника и поглотителя спектр поглощения представляет собой зеркальное отражение спектра излучения относительно прямой  $E = E_0$ . Само резонансное поглощение возникает за счет двух эффектов, которые по-разному зависят от температуры. Во-первых, внешние края участков теплового распределения в спектрах излучения и поглощения будут немного перекрываться в окрестностях энергии  $E = E_0$ . Это перекрытие *уменьшается* как при понижении температуры источника, так и при понижении температуры поглотителя. Во-вторых, вклад от пиков при энергии  $E = E_0$  в спектрах излучения и поглощения *возрастает* с понижением температуры. Так как фактор Дебая — Валлера дается экспоненциальной функцией, то этот последний вклад может стать значительным только тогда, когда одновременно температуры и источника, и поглотителя будут настолько низкими, что оба фактора Дебая — Валлера будут иметь значительную величину.

Мессбауэр в своих экспериментах начал с того, что решил определить естественную ширину линии взятого им  $\gamma$ -перехода в ядре  $^{181}\text{Ir}$  путем изучения температурной зависимости формы спектра резонансного поглощения. Если считать, как это думал сначала Мессбауэр, что эта зависимость возникает исключительно за счет перекрытия участков теплового распределения в спектрах, то единственным известным параметром при теоретическом описании этого явления оказывается естественная ширина линии перехода. Следовательно, ее легко можно было бы определить, проводя измерения при нескольких разных температурах. И Мессбауэр действительно установил, что понижение *как* температуры источника, *так* и температуры поглотителя приводит к уменьшению резонансного поглощения, как это и должно было быть, если связывать это уменьшение с уменьшением перекрытия участков теплового распределения в спектрах. И надо сказать, что

при своих измерениях Мессбауэр получил более чем достаточно экспериментальных данных для определения ширины изучаемой им линии, однако он решил понизить температуру и источника, и поглотителя одновременно. И вдруг он обнаружил, что резонансное поглощение *увеличилось*, вместо того чтобы еще более уменьшиться. Этот результат был совершенно непонятным, так как Мессбауэр объяснял все свои эксперименты перекрытием участков теплового распределения в спектрах. Его новый результат можно было легко объяснить, только приняв во внимание вклады от пиков. Сам факт существования этих пиков за много лет до Мессбауэра отмечал еще Лэмб в своей статье по поглощению нейтронов в кристаллах, но на это как-то никто не обратил внимания.

Когда Мессбауэру стало ясно, что большое температурное резонансное поглощение можно объяснить перекрытием узких пиков в спектрах излучения и поглощения, он сообразил, что эту гипотезу можно легко проверить, сообщив доплеровский сдвиг спектру источника или поглотителя. Он рассудил, что если один из спектров сдвинуть на величину, превышающую естественную ширину спектральной линии, то пики уже не будут перекрываться и эффект большого резонансного поглощения исчезнет. Скорости, необходимые для создания этого доплеровского сдвига, должны быть значительно меньше тех, которые были нужны в более ранних экспериментах по исследованию резонансного поглощения, когда с помощью доплеровского сдвига проводилась компенсация потерь на энергию отдачи  $R$  излучающего ядра; теперь доплеровский сдвиг должен быть только порядка величины естественной ширины линии. Для случая ядра  $^{191}\text{Ir}$  скорость оказалась порядка нескольких см/с. Она легко достижима, скажем, путем использования диска проигрывателя.

С) времени открытия Мессбауэром эффекта последний был обстоятельно изучен и в настоящее время имеет многочисленные применения.

### § 8. Температурный сдвиг

До сих пор при наших теоретических рассмотрениях мы считали ядро точечной частицей, имеющей массу  $M$  и движущейся под действием внешних сил в потенциале гармонического осциллятора. Эта крайне упрощенная модель излучающего ядра, как оказалось, позволяет прекрасно объяснить многие эксперименты по эффекту Мессбауэра. Однако в опытах по эффекту Мессбауэра, проводимых с повышенной точностью и с бóльшей чувствительностью, наблюдаются и такие эффекты, которые нельзя описать без точного и полного учета свойств излучающего ядра. Один из таких эффектов — так называемый *температурный сдвиг*, т. е.



эффект зависимости энергии излучаемого  $\gamma$ -кванта от температуры. Этот эффект был обнаружен экспериментально в опытах, первоначально ставившихся для измерения красного гравитационного смещения, и был теоретически предсказан студентом последнего курса Кембриджского университета Б. Д. Джозефсоном.

Для теоретического описания температурного сдвига достаточно внести лишь небольшие уточнения в наше предыдущее рассмотрение. Ядро по-прежнему можно считать точечной частицей, движущейся под действием внешних сил, как до, так и после акта излучения  $\gamma$ -кванта. Однако, согласно формуле  $E = mc^2$ , связывающей массу и энергию, масса ядра после излучения  $\gamma$ -кванта изменится на величину  $E_\gamma/c^2$ . Хотя это изменение массы и ничтожно мало, точность экспериментов по эффекту Мессбауэра достаточно высока, чтобы его наблюдать.

Рассмотрим, аналогично тому, как это было сделано в § 3 настоящей главы, ядро как точечную частицу, движущуюся во внешнем одномерном осцилляторном потенциале. Согласно (2.15), гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega^2 x^2. \quad (2.15)$$

Обозначим через  $M$  массу частицы, которая представляет ядро и находится в своем основном состоянии после испускания  $\gamma$ -кванта. Гамильтониан (2.15) описывает, следовательно, движение точечной частицы в потенциале после излучения ею  $\gamma$ -кванта. До излучения  $\gamma$ -кванта масса нашей частицы имела другую величину, определяемую соотношением

$$M' = M + \delta M, \quad (2.46a)$$

где

$$\delta M = E_\gamma/c^2. \quad (2.46b)$$

Рассматриваемое изменение массы, конечно, не оказывает влияния на силы, связывающие в осцилляторном потенциале нашу частицу. Следовательно, гамильтониан, описывающий движение частицы до излучения ею  $\gamma$ -кванта, получается из (2.15) простой заменой  $M$  на  $M'$  в выражении для кинетической энергии, т. е. мы имеем

$$H' = \frac{p^2}{2M'} + \frac{M\omega^2}{2} x^2, \quad (2.47a)$$

$$= \frac{p^2}{2M'} + \frac{M'}{2} \left( \frac{M}{M'} \omega^2 \right) = \frac{p^2}{2M'} + \frac{M'\omega'^2}{2} x^2, \quad (2.47b)$$

где

$$\omega' = \sqrt{\frac{M}{M'}} \omega. \quad (2.47b)$$

Так как отношение  $\delta M/M$  мало, то, разлагая по нему правую часть (2.47в), получаем

$$\omega' \approx \omega \left( 1 - \frac{\delta M}{2M} \right) = \omega \left( 1 - \frac{E_\gamma}{2Mc^2} \right). \quad (2.47г)$$

Пусть частица первоначально находилась в состоянии  $|n'\rangle$ , являющемся собственным состоянием измененного гамильтониана  $H'$ , определяемого формулой (2.47а), в которую входит масса  $M'$ . Если после излучения  $\gamma$ -кванта частица окажется в соответствующем возбужденном состоянии  $|n'\rangle$  неизмененного гамильтониана, определяемого формулой (2.15), в которую входит масса  $M$ , то энергию  $\gamma$ -кванта можно было бы считать равной  $E_0$ , если пренебречь изменением массы излучающего ядра. Изменение массы приводит, однако, к очень небольшому изменению, или сдвигу, энергии  $\gamma$ -кванта. Его можно вычислить следующим образом. Энергии начального и конечного состояний движения ядра в осцилляторном потенциале даются формулами

$$E_i = \left( n' + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega', \quad (2.48а)$$

$$E_f = \left( n' + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \quad (2.48б)$$

Энергия излученного  $\gamma$ -кванта равна

$$E_\gamma = E_0 + E_i - E_f = E_0 + \left( n' + \frac{1}{2} \right) \hbar (\omega' - \omega). \quad (2.49а)$$

Подставляя (2.47г) в (2.49а), получаем

$$E_\gamma \approx E_0 - \frac{1}{2} \left( n' + \frac{1}{2} \right) \frac{\delta M}{M} \hbar \omega. \quad (2.49б)$$

Подставляя, наконец, (2.46б), находим

$$E_\gamma \approx E_0 \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left( n' + \frac{1}{2} \right) \frac{Mc^2}{\hbar \omega} \right\}. \quad (2.49в)$$

Таким образом, сдвиг энергии  $\gamma$ -кванта зависит от того, какое взято возбужденное состояние  $|n'\rangle$ , описывающее движение ядра в осцилляторном потенциале.

Формулы (2.49) можно получить также из теории возмущений. Правда, для частицы, находящейся в потенциале гармонического осциллятора, расчет по теории возмущений ничуть не проще, чем точный. Однако расчеты по теории возмущений, конечно, намного проще точных для более сложных систем, например в случае ядра в кристалле, когда получить точное решение оказывается намного труднее. Поэтому ниже мы проведем расчет по теории возмущений в рассматриваемом случае заданного внешнего

потенциала, чтобы получить формулы, которые потом легко можно будет обобщить на другие более сложные случаи.

Вычислим по теории возмущений энергию  $\gamma$ -кванта с точностью до первого порядка по  $\delta M$ . Запишем гамильтониан  $H'$  в виде суммы невозмущенного гамильтониана и возмущения:

$$H' = H + \left( \frac{1}{2M'} - \frac{1}{2M} \right) p^2. \quad (2.47д)$$

Нам нужно вычислить разность между энергией состояния  $|n'\rangle$  гамильтониана  $H$  [см. (2.15)] и энергией соответствующего состояния гамильтониана  $H'$  [см. (2.47)]. С точностью до членов первого порядка по  $\delta M$  эта разность равна поправке первого порядка, рассчитанной по теории возмущений, к собственной энергии невозмущенного гамильтониана (2.47д). Таким образом, сразу получаем

$$\varepsilon_1 = \left( \frac{1}{2M'} - \frac{1}{2M} \right) \langle n' | p^2 | n' \rangle, \quad (2.50)$$

где  $|n'\rangle$  — собственное состояние невозмущенного гамильтониана  $H$ .

С точностью до членов первого порядка по  $\delta M$  формулу (2.50) можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &\approx -\frac{1}{2M} \frac{\delta M}{M} \langle n' | p^2 | n' \rangle = \\ &= -\frac{\delta M}{M} \langle n' | E_{\text{кин}} | n' \rangle = -\frac{1}{2} E_\gamma \left\langle n' \left| \frac{v^2}{c^2} \right| n' \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.51a)$$

отсюда получаем

$$E_\gamma = E_0 \left( 1 - \frac{1}{2} \left\langle n' \left| \frac{v^2}{c^2} \right| n' \right\rangle \right), \quad (2.51б)$$

где  $E_{\text{кин}}$  — оператор кинетической энергии ( $E_{\text{кин}} = p^2/2M$ ), а  $v$  — скорость частицы ( $v = p/M$ ). Формула (2.51б) в точности совпадает с формулой (2.49б), полученной при точном расчете, если в последней отбросить все члены выше первого порядка малости по  $\delta M$ . Этого следовало ожидать, так как по теории возмущений расчет приводит к результату в виде степенного ряда по возмущению и поправка первого приближения имеет как раз первый порядок по  $\delta M$ .

Формула (2.51б) имеет вид формулы для доплеровского сдвига; и она действительно дает вклад второго порядка по  $v/c$  в этот сдвиг. Простой вывод формулы для доплеровского сдвига можно получить в рамках специальной теории относительности, если рассмотреть эффект замедления времени. Возьмем малый промежуток времени  $dt$  в лабораторной системе отсчета. Величина соответствующего промежутка времени  $dt_0$ , рассматриваемого в си-

стеме отсчета, в которой покоится частица, движущаяся со скоростью  $v$ , связана с  $dt$  известной релятивистской формулой

$$dt = \frac{dt_0}{(1 - v^2/c^2)^{1/2}} \approx dt_0 \left[ 1 + \frac{v^2}{2c^2} \right]. \quad (2.52)$$

Интегрируя эту формулу по интервалу времени  $\tau_0$ , определяемому в покоящейся системе отсчета, для соответствующего интервала времени в лабораторной системе получаем

$$\tau = \int_0^{\tau_0} dt_0 \left[ 1 - \frac{v^2}{2c^2} \right] = \tau_0 \left[ 1 + \frac{\langle v^2 \rangle}{2c^2} \right], \quad (2.53)$$

где  $\langle v^2 \rangle$  — среднее значение (усредненное по всему интервалу времени). Заметив, что отношение частот процессов в двух системах отсчета обратно отношению временных интервалов, мы сразу получаем формулу, совпадающую с формулой (2.51б).

Экспериментально обнаруженный в эффекте Мессбауэра температурный сдвиг еще раз подтверждает вывод специальной теории относительности, связанный со знаменитым «парадоксом близнецов». Ядро, движущееся взад и вперед в потенциальном поле, ведет себя как близнец, который улетает к далекой звезде и возвращается обратно. Частота излучения этого ядра меньше, чем другого ядра (его близнеца), покоящегося в лабораторной системе отсчета, во столько раз, во сколько, согласно формуле (2.53),  $\tau_0$  меньше  $\tau$ . Так как частота фиксированного ядерного перехода может служить эталоном времени, а сам этот переход использоваться для конструирования часов, то отсюда мы приходим к выводу, что движущиеся часы идут медленнее, чем покоящиеся.

Из формулы (2.51а) видно, что сдвиг энергии  $\gamma$ -кванта пропорционален средней кинетической энергии ядра, излучающего  $\gamma$ -квант, и, следовательно, зависит от температуры системы, частью которой является наше ядро. Этот сдвиг поэтому и называют «температурным сдвигом». Для экспериментального наблюдения температурного сдвига необходимо иметь источник  $\gamma$ -излучения и идентичный с ним поглотитель. Резонансная энергия в поглотителе также немного сдвигается из-за того, что масса поглощающего  $\gamma$ -квант ядра изменяется при переходе его в возбужденное состояние. Расчет сдвига энергии линии резонансного поглощения проводится в точности так же, как и приведенный выше расчет сдвига энергии линии излучения; в результате получаем точно те же формулы, какие были найдены нами выше [см. (2.49) и (2.51)]. Таким образом, если ядра в источнике и в поглотителе находятся в одном и том же возбужденном состоянии (т. е. имеют одинаковую среднюю кинетическую энергию), то сдвиги из-за

изменения массы ядер при излучении и поглощении совершенно одинаковы для источника и поглотителя и резонансное поглощение происходит так же, как и при отсутствии этих сдвигов. Если, однако, состояния возбуждения излучающего и поглощающего ядер различны, т. е. если источник и поглотитель имеют разные температуры, то сдвиг линий в источнике будет отличаться от сдвига линий в поглотителе и мы будем наблюдать эффект температурного сдвига. Резонансное поглощение при этих условиях не может наблюдаться, пока разницу в сдвигах мы не скомпенсируем введением какого-нибудь дополнительного смещения спектральных линий, например доплеровского.

В реальных экспериментах изменяют температуру источника и поглотителя и, кроме того, поглотитель заставляют двигаться для создания дополнительного доплеровского сдвига. В экспериментах исследуют зависимость интенсивности резонансного поглощения от температуры источника, от температуры поглотителя и от скорости движения поглотителя. Экспериментальные результаты хорошо согласуются с теоретической формулой (2.516). В одноатомном гармоническом монокристалле кинетическая энергия любого данного атома равна половине полной энергии кристалла в расчете на один атом. Таким образом, зависимость температурного сдвига от температуры определяется удельной теплоемкостью образца и дается простой формулой

$$\frac{dE_\gamma}{dT} = -C_L/\mu'c^2, \quad (2.54)$$

в которой  $\mu'$  — вес 1 г-атома вещества, из атомов которого построена кристаллическая решетка. Это значит, что измерение температурного сдвига в эффекте Мессбауэра можно использовать как метод экспериментального определения средней кинетической энергии атома в решетке, т. е. теплоемкости решетки.

### Задачи

1. Выясните, можно ли экспериментально наблюдать эффект Мессбауэра при следующих условиях.

Излучающее ядро имеет массу  $A = 100$ . Силы связи этого ядра в кристалле таковы, что их грубо можно описать потенциалом гармонического осциллятора с энергией  $\hbar\omega$ , равной тепловой энергии  $kT$  при комнатной температуре. Эксперимент проводится при температуре ниже комнатной. Эксперимент возможен, если вероятность излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_0$ , необходимой для резонансного поглощения, будет не меньше 1%.

а) Для какого диапазона энергий  $\gamma$ -квантов эксперимент действительно можно будет провести?

б) Предположим, что условия другого эксперимента таковы, что вероятность излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_0$  должна быть не меньше 30%. Для какого диапазона энергий  $\gamma$ -кванта можно провести этот измененный эксперимент?

в) Как изменятся ответы на вопросы «а» и «б», если взять массу ядра равной  $A = 50$ ? Если сделать ее равной  $A = 200$ ?

2. а) Считайте, что в начальный момент времени  $t = 0$  частица, моделирующая ядро, находится в основном энергетическом состоянии гармонического осциллятора, и получите в явном виде выражение для вероятности перехода ее в любое состояние  $|n'\rangle$  после излучения ядром  $\gamma$ -кванта. Для облегчения расчетов воспользуйтесь формализмом вторичного квантования, т. е. введите операторы рождения и уничтожения  $a^\dagger$  и  $a$ .

б) Используйте результаты задачи «а» и убедитесь в том, что полная вероятность перехода, просуммированная по всем состояниям  $|n'\rangle$ , равна единице. Проверьте, что действительно выполняются правила сумм для первого (2.43в) и второго (2.43г) моментов спектральной функции  $\gamma$ -спектра.

3. В качестве простой теоретической модели для эффекта Мессбауэра в анизотропном кристалле рассмотрите частицу, связанную анизотропным трехмерным потенциалом гармонического осциллятора. Считайте, что ее гамильтониан имеет вид

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{p_y^2}{2M} + \frac{p_z^2}{2M} + \frac{1}{2} M\omega_x^2 x^2 + \frac{1}{2} M\omega_y^2 y^2 + \frac{1}{2} M\omega_z^2 z^2.$$

Предположите, что частоты колебаний по трем направлениям  $\omega_x$ ,  $\omega_y$  и  $\omega_z$  не равны друг другу.

а) Выведите для трехмерного анизотропного потенциала формулы, аналогичные (2.24), (2.316) и (2.33а).

б) Используйте результаты задачи 2 и, считая справедливыми неравенства  $\omega_x < \omega_y < \omega_z < 1,2\omega_x$ , получите выражения для интенсивностей и энергий первых пяти линий  $\gamma$ -спектра, энергия которых меньше  $E_0$ . Считайте, что частица первоначально находилась в самом нижнем энергетическом состоянии потенциала осциллятора.

в) Найдите интенсивность и энергию первой линии  $\gamma$ -спектра с энергией, большей  $E_0$ .

## Глава 3. ЭФФЕКТ МЕССБАУЭРА ДЛЯ ЯДРА В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

### § 1. Введение

Когда эксперимент по наблюдению эффекта Мессбауэра проводится в лаборатории, ядро, излучающее  $\gamma$ -квант, движется, конечно, не в потенциале гармонического осциллятора, а в поле кристалла под действием сил со стороны всех других атомных ядер. Упрощенную теорию эффекта Мессбауэра, данную в § 3—6 гл. 2, можно очень легко приспособить к описанию реального случая движения излучающего ядра в кристалле. Необходимо лишь заменить гамильтониан осциллятора (2.15) на гамильтониан всего кристалла. После этого преобразования многие формулы, полученные в § 3—6 гл. 2, можно непосредственно применить к случаю излучающего ядра в кристалле. Под «векторами состояний» теперь необходимо понимать «векторы состояний» всего кристалла, а не отдельного ядра, движущегося в потенциале гармонического осциллятора.

Все формулы теории, развиваемой в данной главе, мы получим из основной формулы (2.22), связывающей начальное состояние системы с конечным состоянием, в которое она переходит после излучения  $\gamma$ -кванта. Чтобы применить формулу (2.22) в случае ядра в кристалле, мы должны считать, что  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$  описывают начальное и конечное состояния всего кристалла, а также определить более точно, что координата  $x$  есть координата того конкретного ядра, которое излучает  $\gamma$ -квант, а не какого-нибудь другого ядра в кристалле. Пусть  $x_i$  означает координату любого ядра  $i$  в кристалле. Тогда  $i$  пробегает значения  $i = 1, 2, \dots, N$ , где  $N$  — число атомных ядер в кристалле. Пусть  $x_L$  — координата именно того ядра, которое излучает  $\gamma$ -квант. Координаты  $x_i$  и  $x_L$  — векторы в трехмерном пространстве. В формулу (2.22) входит проекция вектора  $x_L$ , точнее проекция на направление, в котором излучается  $\gamma$ -квант. Таким образом, исходная наша формула в случае кристалла принимает вид

$$|f\rangle = e^{-ik \cdot x_L} |i\rangle. \quad (3.1)$$

Вывод формулы (3.1) для кристалла почти слово в слово повторяет вывод формулы (2.22) для потенциала гармонического осциллятора. Прежде всего мы должны обобщить исходную формулу

для разложения вектора начального состояния  $|i\rangle$  по плоским волнам. Пусть вектор состояния  $|k'\rangle$  полностью характеризует состояние одного ядра как плоскую волну с волновым вектором  $k'$ . Нам необходимо найти способ полностью характеризовать состояния кристалла из  $N$  атомных ядер, имеющего  $3N$  степеней свободы. Полный набор коммутирующих физических величин, описывающих такую квантовомеханическую систему, должен содержать  $3N$  операторов. Для полной характеристики состояния кристалла нужно знать  $3N$  собственных значений этих операторов. Чтобы найти нужное нам обобщенное разложение по плоским волнам, следует импульс  $p_L$  ядра, излучающего  $\gamma$ -квант, обязательно включить в указанный полный набор коммутирующих физических величин. Мы не будем уточнять выбор остальных переменных, так как они описывают движение остальных ядер кристалла, а особенности этого движения нас сейчас не интересуют. Таким образом, пусть  $|k'_L, \alpha'\rangle$  — полный набор таких состояний, для которых движение атома  $x_L$  будет описываться плоской волной с импульсом  $\hbar k'_L$ , а состояние остальных атомов кристалла будет характеризоваться  $\alpha'$ , где  $\alpha'$  — собственные значения некоторого набора  $3N - 3$  операторов, добавляемых к оператору  $\hbar k'_L$  (и выбранных так, что все вместе  $3N$  операторов дают полное описание состояний кристалла).

Итак, запишем разложение начального состояния  $|i\rangle$  по вышеуказанному полному набору:

$$|i\rangle = \sum_{k'_L} \sum_{\alpha'} |k'_L, \alpha'\rangle \langle k'_L, \alpha' | i \rangle. \quad (3.2)$$

Так как  $k'_L$  — вектор в трехмерном пространстве, то он задает три квантовых числа. Суммирование по индексу  $k'_L$  в (3.2) в действительности означает интегрирование по трехмерному  $k$ -пространству. Суммирование по  $\alpha'$  означает суммирование по всем возможным значениям полного набора квантовых чисел  $\alpha'$ .

Выпишем в явном виде шредингеровскую волновую функцию для какого-то конкретного состояния  $|k'_L, \alpha'\rangle$ , чтобы продемонстрировать вид волновой функции квантовой системы многих частиц:

$$\Psi_{k'_L, \alpha'} = e^{ik'_L \cdot x_L} \phi_{\alpha'}(x_1, x_2, \dots, x_{i \neq L}, \dots, x_N). \quad (3.3)$$

Здесь функция  $\phi_{\alpha'}$  — функция, зависящая от координат  $x_i$  всех  $N - 1$  атомных ядер кристалла, кроме ядра  $x_L$ . Наш полный набор состояний  $|k'_L, \alpha'\rangle$ , как это видно непосредственно из (3.3), мы берем таким, что в нем движение ядра  $x_L$  отделено от движения остальных ядер кристалла. Шредингеровская волновая функция имеет вид произведения двух функций, одна из которых зависит



только от координаты  $x_L$ , а вторая — от всех оставшихся координат, кроме  $x_L$ .

Собственные функции гамильтониана рассматриваемой сложной квантовой многочастичной системы имеют, разумеется, не такой вид, как функции (3.3). Движение ядра  $x_L$  сильно коррелировано с движением всех остальных ядер кристалла. Наши же функции (3.3), имеющие вид произведений, описывают состояние, в котором движение ядра  $x_L$  не зависит от движения остальных ядер. Однако набор состояний (3.3) (с разделенными переменными) является полным, а поэтому произвольное начальное состояние системы всегда можно записать в виде линейной комбинации (3.2) этих состояний.

Теперь применим закон сохранения импульса отдельно к каждой обобщенной плоской волне в разложении (3.2) по аналогии с тем, как мы поступали в случае единственного ядра, движущегося в потенциале гармонического осциллятора. Волновой вектор  $k'_L$  состояния  $|k'_L, \alpha'\rangle$  изменится после излучения ядром  $x_L$   $\gamma$ -кванта на величину  $k$  и примет значение  $k'_L - k$ , а состояние движения остальных ядер никак не изменится и они будут продолжать оставаться в состоянии  $\alpha'$ . Таким образом, вектор конечного состояния системы, аналогичный вектору (2.19), имеет следующий вид:

$$|f\rangle = \sum_{k'_L} \sum_{\alpha'} |k'_L - k, \alpha'\rangle \langle k'_L, \alpha' | i\rangle. \quad (3.4)$$

Дальнейшее упрощение формулы (3.4) легко провести, если использовать соотношение, аналогичное (2.20):

$$e^{-ik \cdot x_L} |k'_L, \alpha'\rangle = |k'_L - k, \alpha'\rangle. \quad (3.5)$$

Из вида волновой функции (3.3) непосредственно следует, что значения квантовых чисел  $\alpha'$  не меняются при действии на них оператора  $e^{-ik \cdot x_L}$ . Подставляя (3.5) в (3.4), получаем аналог формулы (2.21):

$$|f\rangle = \sum_{k'_L} \sum_{\alpha'} e^{-ik \cdot x_L} |k'_L, \alpha'\rangle \langle k'_L, \alpha' | i\rangle. \quad (3.6)$$

В (3.6) суммирование по  $k'_L$  и  $\alpha'$  легко выполнить, если использовать условие полноты; таким образом, мы сразу приходим к формуле (3.1). При выводе мы нигде не предполагали, что начальное состояние  $|i\rangle$  имеет какой-то определенный вид, например, является собственной функцией какого-нибудь гамильтониана. Формула (3.1) поэтому справедлива для произвольного начального состояния.

Воспользуемся теперь законом сохранения энергии и найдем спектр энергий  $\gamma$ -квантов. Чтобы вычислить энергию, переданную

кристаллу, или равную ей энергию, унесенную излученным  $\gamma$ -квантом, нам надо знать энергии начального и конечного состояний нашей квантовой системы. Так как эти энергии имеют точные значения только для собственных функций гамильтониана, то в качестве начального состояния мы возьмем какую-нибудь собственную функцию гамильтониана всего кристалла. Обозначим через  $|n'\rangle$  собственный вектор гамильтониана кристалла, соответствующий собственной энергии  $E_{n'}$ . Индекс  $n'$  — краткое обозначение для полного набора квантовых чисел, характеризующих отдельный собственный вектор гамильтониана, например собственные значения некоторого полного набора операторов, коммутирующих между собой и с гамильтонианом кристалла <sup>1)</sup>. Исходя из этих новых только что определенных векторов состояний  $|n'\rangle$ , мы можем разложить конечное состояние  $|f\rangle$  по набору состояний  $|n'\rangle$ , т. е. собственных векторов гамильтониана, а это позволит нам найти форму спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов.

Чтобы найти вид разложения конечного состояния  $|f\rangle$  по состояниям  $|n'\rangle$  и получить формулу для вероятности перехода кристалла в результате излучения им  $\gamma$ -кванта из начального состояния  $|n'\rangle$  в состояние  $|n''\rangle$ , воспользуемся тем же самым приемом, который позволил вывести формулы (2.23) и (2.24), когда мы рассматривали движение одной частицы в потенциале гармонического осциллятора. В результате имеем

$$|f\rangle = \sum_{n''} |n''\rangle \langle n'' | f \rangle, \quad (3.7a)$$

$$= \sum_{n''} |n''\rangle \langle n'' | e^{-ik \cdot x_L} | i \rangle, \quad (3.7б)$$

$$= \sum_{n''} |n''\rangle \langle n'' | e^{-ik \cdot x_L} | n' \rangle, \quad (3.7в)$$

$$P_{n' \rightarrow n''} = | \langle n'' | e^{-ik \cdot x_L} | n' \rangle |^2. \quad (3.8)$$

Энергию  $\gamma$ -кванта, излученного при переходе кристалла из состояния  $|n'\rangle$  в состояние  $|n''\rangle$ , можно найти из закона сохранения энергии, в который надо подставить собственные значения энергии *всего* кристалла. Аналогично формуле (2.25), таким образом, имеем

$$E_\gamma = E_0 - (E_{n''} - E_{n'}). \quad (3.9)$$

Так как энергия  $E_\gamma$  зависит от собственных энергий  $E_{n''}$  и  $E_{n'}$  гамильтониана *всего* кристалла, то, чтобы получить более полную формулу для  $E_\gamma$ , нам необходимо прежде всего выбрать для теоретического описания нашего кристалла определенную модель и

<sup>1)</sup> Конкретный пример такого набора операторов будет рассмотрен в § 2 настоящей главы.

вычислить после этого в ее рамках собственные значения энергии кристалла.

Вероятность того, что излученный  $\gamma$ -квант будет иметь энергию, в точности равную  $E_0$ , получим, как и прежде, полагая  $n'' = n'$ . Эту величину опять можно выразить через фурье-образ функции плотности вероятности  $\rho_{n'}(\mathbf{x}_L)$  (обнаружить излучающее ядро в окрестности точки  $\mathbf{x}_L$ ). Однако теперь функция плотности вероятности для ядра  $\mathbf{x}_L$  выражается через полную волновую функцию всего кристалла. Так, рассмотрим шредингеровскую волновую функцию  $\psi_{n'}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ , описывающую состояние  $n'$  всего кристалла. Квадрат модуля этой волновой функции дает вероятность обнаружить атомные ядра кристалла в некотором элементарном объеме  $3N$ -мерного пространства, окружающей точку  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ . Плотность вероятности обнаружить ядро (излучающее  $\gamma$ -квант) в точке  $\mathbf{x}_L$  находится путем усреднения  $3N$ -мерной плотности вероятности по координатам всех остальных ядер:

$$\rho_{n'}(\mathbf{x}_L) = \int \psi_{n'}^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \psi_{n'}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \times \\ \times d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_i \dots d\mathbf{x}_N \quad (i \neq L). \quad (3.10)$$

Используя определение (3.10) функции плотности вероятности излучающего ядра, мы получаем формулу, которая аналогична (2.28) и согласно которой  $P_{n' \rightarrow n'}$  равно квадрату фурье-образа этой функции плотности:

$$P_{n' \rightarrow n'} = \left| \int \rho_{n'}(\mathbf{x}_L) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L} d\mathbf{x}_L \right|^2. \quad (3.11)$$

Разлагая формулу (3.11) при малых  $k$  и преобразуя ее для случая гауссовой формы функции плотности вероятности, получаем формулы, в точности аналогичные (2.30) и (2.31):

$$P_{n' \rightarrow n'} \approx 1 - \langle (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L)^2 \rangle \text{ при малых } k, \quad (3.12a)$$

$$P_{n' \rightarrow n'} = e^{-\langle (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L)^2 \rangle} \text{ для гауссовой формы функции плотности вероятности.} \quad (3.12b)$$

Здесь

$$\langle (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L)^2 \rangle = \int \rho_{n'}(\mathbf{x}_L) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L)^2 d\mathbf{x}_L. \quad (3.12в)$$

Все результаты § 6 гл. 2 в отношении правил сумм и формул для моментов спектральной функции (спектра энергии излученных  $\gamma$ -квантов) остаются справедливыми и для рассматриваемого сейчас случая  $\gamma$ -излучения ядром, связанным в кристалле. Формулы (2.34)—(2.45) можно применять непосредственно. Правда, под векторами состояний, входящих в них, надо понимать векторы состояний *всего* кристалла, а не отдельного ядра, движущегося во

внешнем осцилляторном потенциале, а под  $H$  надо понимать гамильтониан кристалла в целом. Координату  $x$  надо заменить на координатный вектор  $\mathbf{x}_L$ , а  $kx$  — на  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L$ . При выводе формул для моментов спектральной функции спектра энергий  $\gamma$ -квантов в § 6 гл. 2 использовалось только одно свойство гамильтониана, выраженное формулой (2.40). В случае кристалла эту формулу можно записать следующим образом:

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L} H e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_L} = H - \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{M} + R. \quad (3.13)$$

Как легко видеть, формула (3.13) справедлива для любого гамильтониана, который имеет вид

$$H = \frac{p_L^2}{2M} + \text{члены, коммутирующие с } \mathbf{x}_L. \quad (3.14)$$

Согласно формуле (3.14), кинетическая энергия ядра  $\mathbf{x}_L$  должна быть единственным слагаемым в гамильтониане, не коммутирующим с координатой  $\mathbf{x}_L$ . Гамильтониан реального кристалла имеет вид (3.14); члены, коммутирующие с  $\mathbf{x}_L$ , суть операторы кинетических энергий других частиц и потенциалы межатомных сил. Так как эти потенциалы зависят только от координат атомных ядер и не зависят от их скоростей, то они коммутируют с  $\mathbf{x}_L$ . Для реальных кристаллов силы, зависящие от скоростей, пренебрежимо малы. Таким образом, формула (3.13) действительно справедлива в случае кристалла, и из этой формулы и формулы (3.1) можно получить все формулы (2.42)—(2.45) для моментов спектральной функции спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов.

## § 2. Эффект Мессбауэра в строго гармоническом кристалле

Чтобы получить более развернутые формулы для эффекта Мессбауэра для ядра, связанного в кристалле, необходимо рассмотреть во всей полноте динамику движения атомных ядер самого кристалла. Здесь мы сталкиваемся с трудной проблемой учета взаимодействия частиц в квантовой механике. Эта проблема и в квантовой механике, и в классической механике очень сложна, так как для ее решения требуется одновременное совместное рассмотрение большого числа связанных между собой степеней свободы. Как известно, один из способов подхода к такой задаче состоит в попытке разделить степени свободы, т. е. в попытке отыскать такое преобразование, в результате которого переменные, характеризующие различные степени свободы, хотя бы приближенно разделялись. Примером может служить преобразование исходных координат системы, совершающей малые колебания около положения равновесия, к так называемым «координатам

нормальных колебаний». Если такое преобразование, осуществляющее разделение переменных, можно найти, то оно оказывается исключительно полезным и в классической, и в квантовой механике.

При исследовании динамики кристалла практически всегда используется «гармоническое приближение», в котором силы, действующие между ядрами кристаллической решетки, считаются строго гармоническими. Это приближение получается тогда, когда потенциалы взаимодействия между отдельными парами ядер разлагают по степеням расстояний между ними и всеми членами выше второго порядка пренебрегают. Динамика кристалла при этом упрощается, так как оказывается динамикой системы, совершающей малые колебания; ее можно изучать с помощью известного метода нормальных колебаний. Гамильтониан гармонического кристалла после преобразования его к координатам нормальных колебаний представляет собой сумму гамильтонианов независимых гармонических осцилляторов.

Рассмотрим теперь эффект Мессбауэра в таком кристалле, динамика которого точно описывается гармоническим приближением. Пусть все атомные ядра в кристалле имеют одинаковую массу  $M$ . Преобразование к координатам нормальных колебаний — это простое ортогональное преобразование, а гамильтониан, представленный в координатах нормальных колебаний, будет просто суммой гамильтонианов гармонических осцилляторов, т. е.

$$H = \sum_{s=1}^{3N} \left( \frac{\pi_s^2}{2M} + \frac{M\omega_s^2 \xi_s^2}{2} \right) \quad (3.15)$$

где  $\xi_s$ ,  $\pi_s$  и  $\omega_s$  — координаты, импульсы и угловые частоты нормальных колебаний соответственно. Собственные состояния этого гамильтониана можно записать как «кет-векторы» вида  $|\{n'_s\}\rangle$ , где  $\{n'_s\}$  — набор  $3N$  чисел, описывающих состояния возбуждения каждого нормального колебания.

Для вывода формул для эффекта Мессбауэра мы должны произвести вычисления по формуле (3.8). Координату  $x_L$  в (3.8) можно разложить по координатам нормальных колебаний  $\xi_s$ . Отметим, что нам нужно рассматривать только проекцию  $x_L$  на направление волнового вектора  $k$  излученного  $\gamma$ -кванта. Обозначим эту проекцию через  $x_{Lk}$ , так что будем иметь

$$k \cdot x_L = kx_{Lk}. \quad (3.16)$$

Разложим  $x_{Lk}$  по координатам нормальных колебаний

$$x_{Lk} = \sum_{s=1}^{3N} a_{Lk} \xi_s, \quad (3.17)$$

где коэффициенты  $a_{L_s}$  удовлетворяют условию ортонормировки

$$\sum_{s=1}^{3N} a_{L_s}^2 = 1. \quad (3.18)$$

Подставляя (3.17) в (3.8), получаем формулу

$$P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n''_s\}} = |\langle \{n''_s\} | \exp \left( -ik \sum_{s=1}^{3N} a_{L_s} \xi_s \right) | \{n'_s\} \rangle|^2, \quad (3.19a)$$

$$= |\langle \{n''_s\} | \prod_{s=1}^{3N} e^{-ika_{L_s} \xi_s} | \{n'_s\} \rangle|^2. \quad (3.19б)$$

Матричный элемент для произведения операторов, входящего в (3.19б), можно вычислить, рассчитывая отдельно соответствующие матричные элементы для каждого нормального колебания. Так как все эти колебания независимы друг от друга, то состояние  $|\{n'_s\}\rangle$  можно считать прямым произведением  $3N$  индивидуальных состояний для различных нормальных колебаний. Шредингеровская волновая функция состояния кристалла, записанная в координатах нормальных колебаний  $\xi_s$ , будет представлять собой просто произведение волновых функций гармонических осцилляторов:

$$|\{n'_s\}\rangle = \prod_{s=1}^{3N} \psi_{n'_s}(\xi_s) = \prod_{s=1}^{3N} |n'_s\rangle, \quad (3.20)$$

где  $|n'_s\rangle$  означает состояние  $s$ -го гармонического осциллятора нормального колебания кристалла, имеющего частоту  $\omega_s$ . Формулу (3.19б) можно, следовательно, представить в виде произведения квадратов матричных элементов, взятых между состояниями отдельных нормальных колебаний:

$$P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n''_s\}} = \prod_{s=1}^{3N} |\langle n''_s | e^{-ika_{L_s} \xi_s} | n'_s \rangle|. \quad (3.21)$$

Удобные методы вычисления матричных элементов величин, содержащих операторы импульса или координаты гармонического осциллятора в экспоненте, описаны в § 5 настоящей главы. Здесь мы не будем проводить полное вычисление, а используем очень простой приближенный метод оценки величины (3.21). Для микроскопического кристалла  $N$  имеет порядок  $10^{23}$ , т. е. очень велико. Если считать, что все константы  $a_{L_s}$  примерно одного порядка малости, то каждая из них должна быть порядка  $(3N)^{-1/2}$ , так как всего имеется  $3N$  этих констант, а сумма их квадратов равна единице согласно (3.18). Разложим поэтому экспоненты в формуле (3.21) с точностью до членов третьего по-

рядка малости по  $a_{L_s}$  и пренебрежем членами  $a_{L_s}^4$ , имеющими порядок  $(3N)^{-2}$ . Тогда получим формулу

$$P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n''_s\}} = \prod_{s=1}^{3N} |\langle n''_s | 1 - ika_{L_s} \xi_s - \frac{1}{2} k^2 a_{L_s}^2 \xi_s^2 + \frac{1}{6} ik^3 a_{L_s}^3 \xi_s^3 | n'_s \rangle|^2 + O[(3N)^{-1}]. \quad (3.22)$$

Ошибка имеет порядок малости  $(3N)^{-1}$ , так как мы отбросили  $3N$  слагаемых, каждое из которых имеет порядок малости  $(3N)^{-2}$ .

Рассмотрим теперь случай, когда начальное и конечное состояния совпадают, т. е.  $\{n'_s\} = \{n''_s\}$ , и когда излучается  $\gamma$ -квант с полной энергией  $E_0$ . В этом случае матричные элементы, появившиеся в формуле (3.22), диагональны, т. е. просто представляют собой средние значения, берущиеся по соответствующим состояниям гармонического осциллятора. Такие средние значения для нечетных степеней  $\xi_s$  обращаются в нуль, и мы получаем

$$P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n'_s\}} = \prod_{s=1}^{3N} \left| 1 - \frac{1}{2} k^2 a_{L_s}^2 \langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle \right|^2 + O[(3N)^{-1}]. \quad (3.23)$$

Формула (3.23) имеет вид произведения большого числа сомножителей, каждый из которых очень близок к единице. Это произведение можно с большой точностью аппроксимировать экспонентой:

$$\begin{aligned} P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n'_s\}} &\approx \left| \exp \left( -\frac{1}{2} k^2 \sum_{s=1}^{3N} a_{L_s}^2 \langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle \right) \right|^2 \approx \\ &\approx \exp \left( -k^2 \sum_{s=1}^{3N} a_{L_s}^2 \langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle \right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

В законности такой аппроксимации можно легко убедиться, выписывая первые несколько членов разложения формулы (3.23) по малым величинам  $a_{L_s}^2$ , каждая из которых имеет порядок  $(3N)^{-1}$ :

$$\begin{aligned} P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n'_s\}} &= \left| 1 - \frac{1}{2} k^2 \sum_{s=1}^{3N} a_{L_s}^2 \langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8} k^4 \sum_{\substack{t=1 \\ t \neq s}}^{3N} \sum_{s=1}^{3N} a_{L_t}^2 a_{L_s}^2 \langle n'_t | \xi_t^2 | n'_t \rangle \langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle + O[(3N)^{-1}] \right|^2. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Первые два члена разложения в формуле (3.25) в точности совпадают с первыми двумя членами разложения экспоненты в формуле (3.24). Третий член разложения в (3.25) отличается от соответствующего члена в разложении экспоненты в (3.24) отсутствием в двойной сумме членов с  $t = s$ , которые возникают при разложении экспоненты в формуле (3.24). Ошибка, вносимая при аппроксимации произведения (3.23) экспонентой (3.24), имеет, следовательно, порядок  $(3N)^{-1}$ , так как каждый член в двойной сумме по  $t, s$  имеет порядок  $(3N)^{-2}$ , а всего имеется  $3N$  членов с  $t = s$ .

Аппроксимация (3.24), таким образом, очень хороша, так как величина  $(3N)^{-1}$  очень мала. Исползованный нами «экспоненциальный» метод всегда прекрасно работает, если его применять к произведению, составленному из большого числа множителей, каждый из которых очень близок к единице. Отметим, как это непосредственно видно из формулы (3.24), что принятая в ней аппроксимация будет тем более точна, чем более будут благоприятны условия, при которых действительно наблюдается эффект Мессбауэра, т. е. в тех случаях, когда правая часть формулы (3.24) не очень мала и когда вероятность эффекта Мессбауэра такова, что ее еще можно измерить. Скажем, пусть эта вероятность будет не меньше 0,1%. Тогда показатель экспоненты в формуле (3.24) меньше по крайней мере 10, и, следовательно, каждый отдельный член в сумме в (3.24) должен быть очень мал.

### § 3. Фактор Дебая — Валлера и величина эффекта Мессбауэра в случае гармонического кристалла

На основе формулы (3.24) формула (3.126) для фактора Дебая — Валлера может быть получена при гораздо более широких предположениях, чем те, которые были использованы при ее выводе в § 1 настоящей главы, когда мы рассматривали случай одного ядра, находящегося в основном состоянии гармонического осциллятора. Используя (3.17), квадрат среднеквадратичной флуктуации величины  $x_{Lk}$  можно записать через квадраты среднеквадратичных флуктуаций координат нормальных колебаний, т. е.

$$\begin{aligned} \langle \{n'_s\} | x_{Lk}^2 | \{n_s\} \rangle &= \sum_{s=1}^{3N} \sum_{t=1}^{3N} \langle n'_s | a_{Ls} a_{Lt} \xi_s \xi_t | n'_s \rangle = \\ &= \sum_{s=1}^{3N} a_{Ls}^2 \langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle. \end{aligned} \quad (3.26)$$



Подставляя (3.26) в (3.24) и учитывая соотношение (3.16), получаем

$$P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n_s\}} \approx \exp(-k^2 \langle \{n'_s\} | x_{Lk}^2 | \{n_s\} \rangle) \approx \exp(-\langle \{n'_s\} | (k \cdot x_L)^2 | \{n_s\} \rangle). \quad (3.27)$$

Последняя формула в точности совпадает с формулой (3.126). Приведенный нами здесь вывод формулы (3.27) показывает, что она справедлива для любого состояния  $\{n'_s\}$  кристаллической решетки, если только законно сделать следующие два приближения: 1) использовать гармоническое приближение, обосновывающее существование независимых нормальных колебаний кристаллической решетки, 2) допустить, что смещение  $x_L$  ядра, излучающего  $\gamma$ -квант, является суммой многих малых вкладов, вносимых в него отдельными нормальными колебаниями.

При выводе формулы (3.126), данном в § 1 настоящей главы, мы предполагали, что функция плотности вероятности обнаружить ядро в той или иной точке имеет гауссову форму. В выводе, приведенном в данном параграфе, мы получили эту гауссову форму функции плотности вероятности. Сравнивая (3.11) и (3.27), видим, что правая часть формулы (3.27) представляет собой квадрат модуля фурье-образа функции плотности вероятности  $\rho_n(x_L)$ . Так как функция (3.27) имеет гауссову форму по  $k$ , то и фурье-образ этой функции имеет гауссову форму. Такую форму функции распределения можно было бы ожидать заранее, так как мы имеем дело с суммой малых смещений, происходящих от отдельных нормальных колебаний, складывающихся в общее смещение  $x_L$  совершенно случайным образом. Неудивительно, что значения этой суммы, на которую можно посмотреть, как на результат «случайного блуждания», составленного из очень большого числа отдельных шагов, распределены по нормальному, или гауссову, закону, хотя функции распределения вероятностей значений каждой отдельной координаты нормального колебания не обязательно гауссовы.

Найдем теперь в явном виде матричные элементы, входящие в формулу (3.24). Используя свойства гармонического осциллятора, имеем

$$k^2 \langle n'_s | \xi_s^2 | n_s \rangle = k^2 \frac{\hbar \left( n'_s + \frac{1}{2} \right)}{M \omega_s} = \frac{R}{\hbar \omega_s} (2n'_s + 1), \quad (3.28)$$

где  $R$  — энергия отдачи свободного ядра. Подставляя (3.28) в (3.24), получаем

$$P_{\{n'_s\} \rightarrow \{n_s\}} \approx \exp \left\{ -R \sum_{s=1}^{3N} \frac{(a_{Ls})^2}{\hbar \omega_s} (2n'_s + 1) \right\}. \quad (3.29)$$

Формула (3.29) является простым обобщением формулы (2.33а), выведенной нами ранее для случая излучающего ядра, находящегося в основном состоянии гармонического осциллятора. Формула (3.29), выписанная для основного состояния кристалла ( $n'_s = 0$  для всех  $s$ ), отличается от (2.33а) только заменой множителя  $1/\omega$  на среднее значение множителя  $1/\omega_s$  по всем нормальным колебаниям кристалла. Весовые множители  $(a_{Ls})^2$  учитывают важность вкладов каждого из нормальных колебаний, вносимых ими в движение ядра  $\mathcal{X}_L$ . Если кристалл возбужден, т. е. не находится в основном состоянии, то каждый член суммы в (3.29) надо умножить на соответствующий множитель  $(2n'_s + 1)$ .

Формула (3.29) дает величину вероятности того, что излученный  $\gamma$ -квант обладает энергией, в точности равной  $E_0$ , если кристалл и до и после излучения  $\gamma$ -кванта находится в определенном возбужденном состоянии. Конечно, в реальном эксперименте никогда не бывает, чтобы кристалл находился в каком-то одном определенном возбужденном состоянии; его состояние — это статистическая «смесь» собственных состояний, например смесь, соответствующая *термодинамически равновесному состоянию* системы, находящейся в тепловом равновесии с термостатом, имеющим температуру  $T$ . Следовательно, формулу (3.29) нам необходимо *усреднить* по всем начальным состояниям с учетом соответствующих весовых статистических множителей (например больцмановских множителей в случае термодинамически равновесной системы, которые характеризуют относительную вероятность пребывания системы в любом данном чистом состоянии). Полная теория эффекта Мессбауэра для системы, находящейся в тепловом равновесии при температуре  $T$ , будет дана в § 5 настоящей главы. Здесь мы пока просто предположим, что формула для кристалла, находящегося в тепловом равновесии, получается из формулы (3.29), если взять среднее от (3.29) и даже от (3.23) по больцмановскому распределению. Это означает, что, начиная с формулы (3.23) и во всех последующих формулах вплоть до (3.26), надо просто заменить матричные элементы  $\langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle$  на их средние значения при температуре  $T$ :

$$\langle n'_s | \xi_s^2 | n'_s \rangle \rightarrow \langle \xi_s^2 \rangle_T = \frac{\hbar}{M\omega_s} \left( \langle n'_s \rangle_T + \frac{1}{2} \right) = \frac{\hbar}{2M\omega_s} \operatorname{cth} \left( \frac{\hbar\omega_s}{2kT} \right). \quad (3.30a)$$

При этом мы используем хорошо известную формулу для среднего значения квантового числа  $n'_s$  гармонического осциллятора, находящегося в тепловом равновесии:

$$\langle n'_s \rangle_T = \frac{1}{e^{\hbar\omega_s/kT} - 1}. \quad (3.30b)$$

Подставляя (3.30а) в формулы (3.27), получаем выражение для вероятности того, что  $\gamma$ -квант испускается с энергией  $E_0$  в слу-

чае кристалла, находящегося в тепловом равновесии при температуре  $T$ :

$$P(E_0, T) = \exp[-\langle (k \cdot x_L)^2 \rangle_T], \quad (3.31)$$

$$P(E_0, T) = \exp \left\{ -R \sum_{s=1}^{3N} \frac{(a_{Ls})^2}{\hbar \omega_s} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega_s}{2kT} \right\} \quad (3.32)$$

Чтобы применить формулу (3.32) к конкретному кристаллу, необходимо знать для него частоты нормальных колебаний и величины  $a_{Ls}$ .

Прежде чем остановить свой выбор на определенной модели кристалла, мы здесь обсудим некоторые важные особенности полученной формулы (3.32). При нулевой температуре и при температурах, малых по сравнению с энергиями квантов большинства рассматриваемых нормальных колебаний, гиперболический котангенс в (3.32) приближенно равен единице. При этом показатель экспоненты в формуле (3.32) оказывается равным отношению энергии отдачи  $R$  свободного ядра к характерной частоте для данного набора частот нормальных колебаний, а именно к частоте, являющейся «гармоническим средним» частот, взятых с весовыми множителями  $(a_{Ls})^2$ . Вероятность излучения  $P(E_0, T)$  убывает с увеличением температуры; поскольку она является экспоненциальной функцией, то убывает очень быстро, если только оказывается меньшей единицы.

Многие свойства кристалла, рассматриваемого как единое целое, хорошо описываются известной моделью Дебая. При ее использовании сумма в формуле (3.32) по частотам нормальных колебаний заменяется просто на интеграл по непрерывному спектру частот. Окончательный результат оказывается зависящим только от одного параметра, а именно от температуры Дебая  $\theta$ . Таким образом, формула (3.32) при нулевой температуре для модели Дебая сводится к очень простой формуле

$$P_D(E_0, T) = \exp \left( -\frac{3R}{2k\theta} \right). \quad (3.33)$$

Из формулы (3.33) следует простой вывод, что величина эффекта Мессбауэра при нулевой температуре велика, если энергия отдачи свободного ядра меньше  $k\theta$ , и очень быстро стремится к нулю, если  $R$  становится больше  $k\theta$ . Так как  $k\theta$  — характерная энергия отдельного колебания в кристаллической решетке, то приведенное заключение качественно хорошо согласуется с заключением, полученным ранее в случае гармонического осциллятора.

#### § 4. Статистически смешанные и чистые состояния

Займемся теперь эффектом Мессбауэра в случае, когда начальное состояние кристалла не является собственным состоянием, а представляет собой статистическую «смесь» собственных состояний. Ради простоты рассмотрим здесь, как и в гл. 2, модель одномерного гармонического осциллятора. Обобщение на случай кристалла проводится без какого-либо труда.

Пусть  $p_n^{(i)}$  означает вероятность того, что вначале ядро находится в собственном состоянии  $|n'\rangle$  осцилляторного потенциала. Вероятность того, что ядро из состояния  $|n'\rangle$  перейдет в состояние  $|n''\rangle$  после излучения им  $\gamma$ -кванта, дается формулой

$$P_{n' \rightarrow n''} = |\langle n'' | e^{-ikx} | n' \rangle|^2. \quad (2.24)$$

Таким образом, вероятность того, что излучающее ядро после перехода окажется в состоянии  $|n''\rangle$ , равна

$$p_{n''}^{(f)} = \sum_{n'} P_{n' \rightarrow n''} p_{n'}^{(i)} = \sum_{n'} |\langle n'' | e^{-ikx} | n' \rangle|^2 p_{n'}^{(i)}. \quad (3.34)$$

Формулу (3.34) мы получили, просто складывая вероятности классическим образом, так как начальное состояние представляет собой классическую статистическую смесь квантовых состояний. Причина, по которой мы говорим о распределении вероятностей, а не о точном начальном состоянии, заключается в том, что у нас не хватает сведений о системе. Мы просто не можем установить путем измерений, что наша система действительно находится в определенном начальном состоянии, вовсе не возмущая ее этими измерениями. То, что мы не знаем точного начального состояния системы, объясняется чисто экспериментальными трудностями. Это никак не связано с фундаментальными законами квантовой механики.

Совершенно по-другому надо рассуждать в том случае, когда система первоначально находится в каком-либо «чистом» квантовом состоянии, которое не является собственным состоянием гамильтониана нашего осциллятора. Мы можем разложить это начальное состояние  $|a\rangle$  по собственным функциям  $|n'\rangle$  гармонического осциллятора:

$$|a\rangle = \sum_{n'} |n'\rangle \langle n' | a \rangle. \quad (3.35)$$

При этом вероятность обнаружить систему, находящуюся в состоянии  $|a\rangle$ , в собственном состоянии  $|n'\rangle$  осциллятора дается формулой

$$p_{n'}^{(a)} = |\langle n' | a \rangle|^2; \quad (3.36)$$

в нее входят только квадраты модулей коэффициентов разложения (3.35). Таким образом, если мы знаем, что система находится в начальном состоянии  $|a\rangle$ , т. е. знаем все коэффициенты разложения начального состояния в (3.35), то мы располагаем большей информацией о состоянии, чем та, которая получается, когда мы просто знаем распределение вероятностей (3.36). Теперь мы знаем не только модули, а еще и фазы коэффициентов разложения  $\langle n' | a \rangle$ . Начальное состояние  $|a\rangle$  представляет собой «когерентную суперпозицию» отдельных собственных состояний  $|n'\rangle$  гармонического осциллятора, и различные члены разложения в (3.35) могут интерферировать друг с другом. Напротив, статистическое распределение (3.34) является «некогерентной смесью» различных состояний  $|n'\rangle$  гармонического осциллятора. Это «нечистое» квантовое состояние. Различные слагаемые в (3.34) не могут интерферировать.

Найдем теперь вероятность того, что система, находящаяся первоначально в чистом квантовом состоянии  $|a\rangle$ , окажется в состоянии  $|n''\rangle$  после излучения ею  $\gamma$ -кванта. Используя формулы (2.22) или (2.24), находим

$$P_{a \rightarrow n''} = |\langle n'' | e^{-ikhx} | a \rangle|^2; \quad (3.37a)$$

$$= \left| \sum_{n'} \langle n'' | e^{-ikhx} | n' \rangle \langle n' | a \rangle \right|^2; \quad (3.37б)$$

$$= \sum_{n'' n'''} \langle n'' | e^{-ikhx} | n' \rangle \langle n'' | e^{ikhx} | n'' \rangle \langle n' | a \rangle \langle a | n''' \rangle. \quad (3.37в)$$

Формула (3.37), полученная нами для чистого начального состояния, во многом аналогична формуле (3.34), выведенной для некогерентной статистической смеси состояний; имеется лишь одно важное различие. В формулу (3.37б) входит квадрат модуля суммы, берущейся по состояниям  $|n'\rangle$ , а формула (3.34) содержит сумму квадратов модулей отдельных слагаемых; при этом в формуле (3.34) вместо величин  $p_n^{(i)}$  нужно взять значения, даваемые формулой (3.36). Различие между формулами (3.37) и (3.34) особенно отчетливо проступает в формуле (3.37в), в которой квадрат модуля суммы из (3.37б) выписан в явном виде с помощью двойной суммы. Если в (3.37в) положить  $n'' = n'$ , то в точности получится формула (3.34). Разница между «когерентной суперпозицией» и «некогерентной смесью» состояний проистекает от наличия перекрестных членов, для которых  $n' \neq n''$  и которые зависят очевидным образом от фаз величин  $\langle n' | a \rangle$ . Если данные величины, являющиеся коэффициентами разложения в (3.35), записать в виде

$$\langle n' | a \rangle = |\langle n' | a \rangle| e^{i\phi_{n'}},$$

то из (3.37в) мы получим формулу

$$P_{a \rightarrow n''} = \sum_{n', n'''} \langle n'' | e^{-i\hbar x} | n' \rangle \langle n'' | e^{i\hbar x} | n''' \rangle | \langle n' | a \rangle \langle a | n''' \rangle | e^{i(\phi_{n'} - \phi_{n''})}. \quad (3.37г)$$

Теперь формулу (3.34) легко можно получить из формулы (3.37г) для некогерентной смеси состояний, если положить, что фазы  $\phi_{n'}$  нам совершенно неизвестны и что мы должны усреднить результаты большого числа экспериментов, проведенных для чистых состояний, каждое из которых характеризуется некоторыми конкретными значениями фаз  $\phi_{n'}$ . Если усреднить формулу (3.37г) по всем значениям фаз  $\phi_{n'}$  и  $\phi_{n''}$ , то при этом все члены с  $n' \neq n''$  выпадут и формула (3.37г) перейдет в формулу (3.34).

### § 5. Эффект Мессбауэра для системы, находящейся в состоянии теплового равновесия

Формула (3.34) не имеет практической ценности, так как распределение вероятностей конечных состояний нельзя измерить ни в одном эксперименте. Энергия  $\gamma$ -кванта зависит от разности энергий конечного и начального состояний. Вероятность того, что будет излучен  $\gamma$ -квант с энергией  $E_0$ , необходимой для резонансного поглощения, равна вероятности того, что конечное состояние окажется в точности таким же, как начальное состояние. Последнюю вероятность можно найти, полагая в формуле (2.24)  $n'$  равным  $n''$  и затем усредняя ее по распределению уровней  $n'$  для известного статистического начального состояния:

$$P(E_\gamma = E_0) = \sum_{n'} |\langle n' | e^{-i\hbar x} | n' \rangle|^2 p_n^{(i)}. \quad (3.38)$$

Будем теперь искать форму спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов. Энергия испущенного  $\gamma$ -кванта  $E_\gamma$  может иметь любое значение  $E_0 + n\hbar\omega$ , где  $n$  — любое (положительное, отрицательное или равное нулю) целое число. Обозначим через  $P(n\hbar\omega)$  вероятность излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_\gamma = E_0 + n\hbar\omega$ . К сожалению, формула для  $P(n\hbar\omega)$ , аналогичная (3.38), очень сложна, так как в ней необходимо учитывать вклады от всех пар состояний  $|n'\rangle$  и  $|n''\rangle$ , имеющих заданную разность энергий  $E_\gamma - E_0$ , и проводить по ним усреднение.

Вместе с тем суммирования по таким парам состояний можно легко избежать, если вычислить сначала величины моментов спектральной функции спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов, которые определяются в точности так же, как моменты из § 6 гл. 2. В формулы из § 6 гл. 2 для моментов входят только диагональные матричные элементы известных операторов для начального состояния. Соответствующие формулы для моментов спектральной

функции в случае заданного статистического распределения начальных состояний можно получить, усредняя эти диагональные матричные элементы по начальным состояниям. Таким образом, из (2.366) имеем

$$\langle E_{\gamma}^m \rangle = \sum_{n'} \langle n' | e^{ikh} (E_0 - H + E_{n'})^m e^{-ikh} | n' \rangle p_{n'}^{(i)}. \quad (3.39)$$

Для системы, находящейся в термодинамическом равновесном состоянии при температуре  $T$ , коэффициенты  $p_{n'}^{(i)}$  являются бальцовскими множителями:

$$p_{n'}^{(i)} = N e^{-\beta E_{n'}}, \quad (3.40)$$

где  $\beta = 1/kT$  и  $N$  — нормировочный множитель. Мы можем, следовательно, написать формулу

$$\langle E_{\gamma}^m \rangle_T = N \sum_{n'} \langle n' | e^{ikh} (E_0 - H + E_{n'})^m e^{-ikh} e^{-\beta H} | n' \rangle; \quad (3.41)$$

здесь мы использовали тот факт, что при действии гамильтониана  $H$  на собственное состояние  $|n'\rangle$  последнее просто умножается на собственное значение  $E_{n'}$ .

По формуле (3.39) можно вычислить среднее значение  $m$ -й степени  $E_{\gamma}$ , усредненной по энергетическому спектру. Однако непосредственно пользоваться формулой (3.39) для вычислений неудобно, так как величина  $n'$ , по которой проводится суммирование, входит в качестве индекса и в оператор, и в вектор состояния. Это усложняет суммирование. Однако мы можем суммирование вести не для среднего значения функции  $E_{\gamma}^m$ , а для среднего значения другой (более удобной) функции от  $E_{\gamma}$ . Действительно, используя формулу (3.39), можно легко найти формулу для среднего значения любой функции от  $E_{\gamma}$ :

$$\langle f(E_{\gamma}) \rangle = N \sum_{n'} \langle n' | e^{ikh} f(E_0 - H + E_{n'}) e^{-ikh} e^{-\beta H} | n' \rangle \quad (3.42)$$

и, в частности, получить

$$\langle e^{-iE_{\gamma}t/\hbar} \rangle = N \sum_{n'} \langle n' | e^{ikh} e^{-i(E_0 - H + E_{n'})t/\hbar} e^{-ikh} e^{-\beta H} | n' \rangle; \quad (3.43)$$

здесь  $t$  — просто параметр, имеющий размерность времени. Позже мы увидим, что временная переменная  $t$  имеет простой физический смысл. Сейчас он нам не нужен, и мы отметим здесь только, что время — это физическая величина, канонически сопряженная с энергией, и что фурье-образ любой спектральной функции для любого энергетического спектра является функцией от переменной, имеющей размерность времени. Следовательно, формула (3.43) — фурье-образ спектральной функции спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов.

Формулу (3.43) можно существенно упростить, так как операторную экспоненту в (3.43) можно представить в виде произведения трех экспоненциальных множителей, соответствующих трем слагаемым  $E_0 - H + E_{n'}$ . Так как  $E_0$  и  $E_{n'}$  — числа, а не операторы, отвечающие им экспоненциальные множители можно как угодно переставлять с любыми множителями в формуле (3.43), не заботясь о коммутаторах. Поэтому мы перенесем множитель  $e^{-iE_0 t}$  налево, а множитель  $e^{iE_{n'} t}$  направо в формуле (3.43). Теперь, так же как ранее мы это делали с больцмановским множителем, заменим  $E_{n'}$  в экспоненте на оператор  $H$ , поделим правую и левую части формулы на  $e^{-iE_0 t}$  и окончательно получим

$$\langle e^{-i(E_{\gamma} - E_0)t/\hbar} \rangle = N \sum_{n'} \langle n' | e^{ikx} e^{iHt/\hbar} e^{-ikx} e^{-(it/\hbar + \beta)H} | n' \rangle. \quad (3.44)$$

Как видно, от индекса  $n'$  оператор в (3.44) теперь явно не зависит, и, поскольку сумма всех диагональных матричных элементов оператора — это *след* оператора, формулу (3.44) можно записать также в следующем виде:

$$\langle e^{-i(E_{\gamma} - E_0)t/\hbar} \rangle = N \text{Sp} \{ e^{ikx} e^{iHt/\hbar} e^{-ikx} e^{-(it/\hbar + \beta)H} \}. \quad (3.45)$$

Отметим, что при выводе формулы (3.45) мы нигде не использовали то, что излучающее ядро движется в потенциале гармонического осциллятора, и поэтому формула (3.45) справедлива в самом общем случае любой излучающей системы. При этом  $H$ , конечно, должно обозначать гамильтониан, описывающий полную систему, частью которой является движущееся ядро, излучающее  $\gamma$ -квант. В частности, формулу (3.45) можно использовать в теории эффекта Мессбауэра для ядра, связанного в кристалле. Формула (3.45) имеет вид формулы для среднего значения оператора, берущегося по статистическому смешанному состоянию, и характерна для формализма, использующего *оператор плотности*. Оператор плотности, описывающий рассматриваемое здесь начальное состояние системы, есть  $\rho = N e^{-\beta H}$ . Поэтому формулу (3.45) можно записать также следующим образом:

$$\langle e^{-i(E_{\gamma} - E_0)t/\hbar} \rangle = \text{Sp} \{ \rho e^{ikx} e^{iHt/\hbar} e^{-ikx} e^{-iHt/\hbar} \}, \quad (3.46)$$

или в виде

$$\langle e^{-i(E_{\gamma} - E_0)t/\hbar} \rangle = \text{Sp} \{ \rho e^{ikx_{\mathbf{n}}(0)} e^{-ikx_{\mathbf{n}}(t)} \}; \quad (3.47)$$

здесь  $x_{\mathbf{n}}(t)$  — зависящий от времени  $t$  оператор  $x$ , взятый в представлении Гейзенберга.

В § 7 настоящей главы мы совершенно точно вычислим правую часть формулы (3.47) в случае гармонического осциллятора, а также в случае гармонического кристалла. Но прежде задержимся на любопытной физической интерпретации формулы (3.47). На



нее можно посмотреть как на формулу, описывающую спектр энергий излученных  $\gamma$ -квантов движущимся точечным источником, положение которого в трехмерном пространстве описывается оператором координаты  $x_H(t)$ . Если источник покоится, то  $x_H(t)$  не зависит от  $t$  и из формулы (3.47) сразу можно сделать заключение, что фурье-образ спектральной функции спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов, отсчитанных от  $E_0$ , также не зависит от  $t$ . Следовательно, спектр энергий состоит из единственной линии излучения с частотой  $E_0/\hbar$ , что, как мы видим, полностью согласуется с классической теорией. Если оператор  $x_H(t)$  зависит от  $t$ , то наблюдается «частотная модуляция» излученной волны.

### § 6. Излучение классическим осциллятором

Результаты точной квантовомеханической теории [см (3.47)] полностью аналогичны результатам классической теории, в чем можно легко убедиться, если рассмотреть подробно классическое электромагнитное излучение, испускаемое точечным источником, движущимся по известному сложному закону во время излучения. Для простоты рассмотрим одномерное движение. Обозначим через  $x(t)$  положение источника в момент времени  $t$ , через  $\omega_0$  — частоту, а через  $k$  — волновой вектор излучения наблюдаемого в некоторой удаленной от источника точке. Скорость источника будем считать малой по сравнению с  $c$ . Так как источник движется, то расстояние между ним и точкой, в которой наблюдается его излучение, меняется со временем, и это приводит к временной зависимости фазы у наблюдаемой электромагнитной волны. Электрическое поле в точке наблюдения в момент  $t$  описывается следующим выражением:

$$E(k, t) = E_0 e^{i[\omega_0 t - kx(t)]}; \quad (3.48)$$

здесь  $E_0$  — некоторая постоянная. Так как  $x$  зависит от  $t$ , электромагнитная волна, регистрируемая в точке наблюдения, не будет простой монохроматической волной частоты  $\omega_0$ . Ее частотный спектр  $g(k, \omega)$  будет сложной функцией, являющейся фурье-образом функции (3.48), т. е.

$$g(k, \omega) = N \int_{-\infty}^{\infty} E_0 e^{i[(\omega_0 - \omega)t - kx(t)]} dt, \quad (3.49)$$

где  $N$  — некоторый нормировочный множитель. Квадрат модуля функции (3.49) дает интенсивность фурье-компоненты с частотой

$\omega$ . Интенсивность можно также записать через двойной интеграл по двум временным переменным

$$I(k, \omega) = g^*(k, \omega) g(k, \omega) = N^2 E_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt'' e^{i(\omega_0 - \omega)(t' - t'')} e^{-ik[x(t') - x(t'')]}. \quad (3.50)$$

Введем обозначение  $t = t' - t''$ , тогда получим

$$I(k, \omega) = N^2 E_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega_0 - \omega)t} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik[x(t'+t) - x(t')]} dt', \quad (3.51a)$$

$$= N^2 E_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega - \omega_0)t} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{ikx(t')} e^{-ikx(t'+t)} \quad (3.51b)$$

Формулу (3.51a) можно рассматривать как дающую фурье-образ пространственно-временной «автокорреляционной» функции нашего источника. Показатель экспоненты во втором, внутреннем интеграле в (3.51a) равен изменению  $\delta x(t, t')$  координаты  $x$  точечного источника за интервал времени  $t - t'$ , начинающийся с момента  $t'$ . Интегрирование по  $t'$  в (3.51a) дает среднее значение по времени величины  $e^{-ik\delta x(t, t')}$ , берущейся в разных точках траектории источника. Это среднее, как легко видеть, равно пространственному фурье-образу функции распределения вероятностей  $P(\delta x, t)$ , описывающей вероятность того, что наш источник переместится на расстояние  $\delta x$  за интервал времени  $t$ . Так как первый, внешний интеграл в (3.51a) есть интеграл фурье-образа по времени  $t$ , то все выражение в правой части (3.51a) — величина, пропорциональная фурье-образу пространственно-временной корреляционной функции по пространственной и временной переменным.

Как легко видеть, формула (3.51b) представляет собой классический аналог квантовомеханической формулы (3.47). Классическое усреднение величины по времени, берущейся в разных точках траектории, эквивалентно квантовомеханическому усреднению, вычисляемому по формуле, в которую входит след от произведения оператора этой величины на оператор плотности, характеризующий начальное состояние частицы. Так как движение квантовой системы в стационарном состоянии не зависит от выбора момента начала отсчета времени, то квантовомеханическое среднее по собственному состоянию можно взять в момент  $t' = 0$ . Другими словами, можно заменить операторы  $x_H(0)$  и  $x_H(t)$  в формуле (3.47) на операторы  $x_H(t')$  и  $x_H(t + t')$ . Значение величины, вычисляемой по формуле (3.47), действительно не зависит от  $t'$ . Формула (3.51b) дает, таким образом, частотную спектральную функцию для интенсивности излучения, в то время как

формула (3.47) дает фурье-образ этой функции. Следовательно, формула (3.51б) есть просто фурье-образ среднего значения в классической теории той же самой величины, среднее значение которой в квантовой теории дается формулой (3.47).

Наше рассмотрение легко обобщить на случай системы, составленной из нескольких частиц, движущихся в трехмерном пространстве и когерентно излучающих электромагнитную волну. (Такая модельная система может описывать когерентное рассеяние электромагнитного излучения кристаллом; при этом все атомы кристалла рассматриваются как источники «вторичных» волн.) Пусть  $x_i$  — координата  $i$ -й излучающей частицы, тогда формулы (3.48) и (3.49) можно непосредственно обобщить, введя дополнительное суммирование по индексу  $i$ , нумерующему частицы:

$$E(k, t) = E_0 \sum_i e^{i[\omega_0 t - k \cdot x_i(t)]}, \quad (3.52a)$$

$$I(k, \omega) = N^2 E_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega_0 - \omega)t} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i, j} e^{-ik \cdot [x_i(t'+t) - x_j(t')]} dt'. \quad (3.52b)$$

В последнюю формулу входит двухчастичная корреляционная функция, так как показатель экспоненты во втором интеграле — это разность координат двух разных частиц в моменты времени  $t' + t$  и  $t'$ , а не координат одной и той же частицы в эти различные моменты времени.

Таким образом, мы видим, что излучение электромагнитных волн классической связанной системой частиц может быть полностью охарактеризовано двухчастичной пространственно-временной корреляционной функцией многочастичной системы. Наоборот, исследуя зависимость интенсивности излучения от волнового числа  $k$  и частоты  $\omega$ , можно получить полную информацию о виде этой пространственно-временной двухчастичной корреляционной функции нашей системы частиц. Это заключение справедливо и в квантовой механике.

### **§ 7. Эффект Мессбауэра для гармонического осциллятора и для гармонического кристалла, находящегося в тепловом равновесии**

Проведем теперь вычисления по формуле (3.47) в случае излучающего ядра, движущегося в потенциале одномерного гармонического осциллятора. В этом случае квантовые гейзенберговские уравнения движения можно точно разрешить и можно найти явные

выражения для входящих в (3.47) операторов в момент времени  $t$  через операторы в момент времени  $t = 0$ :

$$x_{\text{H}}(t) = x_{\text{H}}(0) \cos \omega t + \frac{1}{M\omega} p_{\text{H}}(0) \sin \omega t. \quad (3.53)$$

Отсюда для коммутатора операторов  $x_{\text{H}}(0)$  и  $x_{\text{H}}(t)$  получаем простую формулу

$$[x_{\text{H}}(0), x_{\text{H}}(t)] = \frac{i\hbar}{M\omega} \sin \omega t. \quad (3.54)$$

Так как этот коммутатор — простое число (не оператор), коммутирующее и с  $x_{\text{H}}(0)$ , и с  $x_{\text{H}}(t)$ , произведение операторных экспонент, имеющееся в формуле (3.47), можно записать в виде одного следующего экспоненциального оператора:

$$e^{i\hbar x_{\text{H}}(0)} e^{-i\hbar x_{\text{H}}(t)} = e^{i\hbar[x_{\text{H}}(0) - x_{\text{H}}(t)]} \exp\left(\frac{ik^2\hbar \sin \omega t}{2m\omega}\right). \quad (3.55)$$

Здесь мы использовали известное операторное тождество

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}, \quad (3.56)$$

которое справедливо тогда и только тогда, когда выполняются операторные соотношения

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0.$$

Таким образом, используя (3.55) и (3.53), мы можем написать

$$e^{i\hbar x_{\text{H}}(0)} e^{-i\hbar x_{\text{H}}(t)} = \exp\left[ik\left(x_{\text{H}}(0)(1 - \cos \omega t) - \frac{1}{M\omega} p_{\text{H}}(0) \sin \omega t\right)\right] \times \exp\left(\frac{ik^2\hbar \sin \omega t}{2M\omega}\right). \quad (3.57)$$

Подставляя (3.57) в (3.47), получаем

$$\langle e^{-i(E_{\text{V}} - E_0)t/\hbar} \rangle = N \text{Sp} \left[ \exp\left(ik\left(x_{\text{H}}(0)(1 - \cos \omega t) - \frac{1}{M\omega} p_{\text{H}}(0) \sin \omega t\right)\right) e^{-\beta H} \right] \exp\left(\frac{i\hbar k^2 \sin \omega t}{2M\omega}\right). \quad (3.58)$$

Формула (3.58) выражает нужную нам величину через среднее значение некоторой экспоненциальной функции, в показателе которой стоит линейная комбинация операторов координаты  $x$  и импульса  $p$  гармонического осциллятора, по термодинамически равновесному состоянию. Существует совершенно общая формула

для вычисления такого типа средних значений, имеющая следующий вид:

$$N \operatorname{Sp} [e^{i\xi(u x - v p)} e^{-\beta H}] = \exp \left[ -\frac{1}{2} \xi^2 \left( \frac{\hbar}{2M\omega} \right) (u^2 + M^2 \omega^2 v^2) \operatorname{cth} \left( \frac{1}{2} \hbar \omega \beta \right) \right]. \quad (3.59)$$

Используя (3.59) для вычисления правой части (3.58), получаем

$$\langle e^{-i(E_\gamma - E_0)t/\hbar} \rangle \exp \left[ -\frac{1}{2} k^2 \left( \frac{\hbar}{M\omega} \right) \left[ (1 - \cos \omega t) \operatorname{cth} \left( \frac{1}{2} \hbar \omega \beta \right) - i \sin \omega t \right] \right] = \exp \left[ \frac{R}{2\hbar\omega \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar \omega \beta \right)} \times \right. \\ \left. \times \left[ e^{i\omega t + \frac{1}{2} \hbar \omega \beta} + e^{-i\omega t - \frac{1}{2} \hbar \omega \beta} - 2 \operatorname{ch} \left( \frac{1}{2} \hbar \omega \beta \right) \right] \right]. \quad (3.60)$$

Теперь мы можем вернуться к нашей основной задаче — определить явный вид спектральной функции  $P(n\hbar\omega)$  спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов. Фурье-образ (3.60) можно выразить через функцию  $P(n\hbar\omega)$ :

$$\langle e^{-i(E_\gamma - E_0)t/\hbar} \rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} P(n\hbar\omega) e^{-in\omega t}. \quad (3.61)$$

Сравнивая формулы (3.61) и (3.60), мы видим, что для определения величин  $P(n\hbar\omega)$  нам нужно попытаться разложить сложную функцию в правой части (3.60) в простой ряд Фурье вида (3.61). Коэффициенты этого ряда как раз и дадут нам непосредственно искомые вероятности  $P(n\hbar\omega)$ . Наличие экспоненциальных функций в показателях экспонент в (3.60), естественно, наталкивает при этом на мысль, что нужно как-то воспользоваться разложением по функциям Бесселя. Действительно, формула (3.60) напоминает формулу для производящей функции, порождающей функции Бесселя:

$$e^{\frac{1}{2} Z(\zeta - \zeta^{-1})} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n(Z) \zeta^n. \quad (3.62)$$

Первое слагаемое в показателе экспоненты (3.60) в точности имеет вид первого слагаемого в показателе экспоненты в (3.62), если положить

$$Z = \frac{iR}{\hbar\omega \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar \omega \beta \right)}, \quad (3.63a)$$

$$\zeta = -ie^{-(i\omega t + \frac{1}{2} \hbar \omega \beta)}. \quad (3.63b)$$

Заметим также, что, согласно (3.30а),

$$\frac{R}{\hbar\omega} \operatorname{cth} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega\beta \right) = \frac{\hbar k^2}{2M\omega} \operatorname{cth} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega\beta \right) = \langle k^2 x^2 \rangle. \quad (3.64)$$

Таким образом, окончательно имеем следующие формулы:

$$\begin{aligned} \langle e^{-i(E_\gamma - E_0)t/\hbar} \rangle &= e^{-\langle k^2 x^2 \rangle} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_n \left[ \frac{iR}{\hbar\omega \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega\beta \right)} \right] \times \\ &\quad \times (-i)^n e^{-\frac{1}{2} n\hbar\omega\beta - in\omega t}, \quad (3.65a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= e^{-\langle k^2 x^2 \rangle} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} I_n \left[ \frac{R}{\hbar\omega \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega\beta \right)} \right] \times \\ &\quad \times e^{-\frac{1}{2} n\hbar\omega\beta} e^{-in\omega t}. \quad (3.65b) \end{aligned}$$

Как видим, формула (3.65b) теперь приобретает такой же вид, как формула (3.61). Приравнявая коэффициенты в обоих рядах, мы получаем формулу для вероятности  $P(n\hbar\omega)$  излучения  $\gamma$ -кванта с энергией  $E_\gamma = E_0 + n\hbar\omega$ :

$$P(n\hbar\omega) = e^{-\langle k^2 x^2 \rangle} I_n \left( \frac{R}{\hbar\omega \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega\beta \right)} \right) e^{-\frac{1}{2} n\hbar\omega\beta}, \quad (3.66a)$$

и, в частности, имеем

$$P(0) = e^{-\langle k^2 x^2 \rangle} I_0 \left( \frac{R}{\hbar\omega \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega\beta \right)} \right). \quad (3.66b)$$

Посмотрим, что дает формула (3.66a) в пределе низких температур  $T \rightarrow 0$ ,  $\beta \rightarrow \infty$ . Для всех положительных значений  $n$  правая часть формулы (3.66a) обращается в нуль. Этого, конечно, следовало ожидать, так как при нулевой температуре излучающее ядро будет находиться в нижнем энергетическом состоянии осцилляторного потенциала и поэтому может только приобретать энергию при переходе, но никоим образом не терять ее при излучении  $\gamma$ -кванта. Таким образом, испускаемый  $\gamma$ -квант может обладать лишь энергией  $E_0$  или меньшей энергией, но не может обладать энергией, большей  $E_0$ . Следовательно, при нулевой температуре формула (3.66a) должна давать не обращающиеся в нуль значения только для отрицательных значений  $n$ . В пределе низких температур формулу (3.66a) можно значительно упростить, разложив

функцию Бесселя  $I_n$  в ряд и оставив только первый член разложения:

$$P(n\hbar\omega) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} e^{-(\hbar^2 x^2)} \frac{1}{n!} \left( \frac{R}{\hbar\omega} \right)^n, \quad n \leq 0. \quad (3.67)$$

В пределе нулевой температуры излучающее ядро должно находиться в нижнем энергетическом состоянии осцилляторного потенциала, т. е. в *чистом* квантовом состоянии. Поэтому формула (3.67) должна давать спектр энергий излученных  $\gamma$ -квантов в согласии с результатом задачи 2а из гл. 2.

Полученную формулу (3.66а) очень легко обобщить на случай строго гармонического кристалла, так как в таком кристалле нормальные колебания независимы и полностью разделяются. Подставим разложение (3.17) для координаты  $x_{Lk}$  по координатам нормальных колебаний в формулу (3.46) и запишем гамильтониан  $H$  и оператор плотности  $\rho$  в виде

$$H = \sum_s H_s, \quad (3.68a)$$

$$\rho = \prod_s \rho_s. \quad (3.68b)$$

Здесь  $H_s$  и  $\rho_s$  — гамильтонианы и экспоненциальные больцмановские операторные множители для отдельных нормальных колебаний  $s$ . Гамильтониан гармонического кристалла — просто сумма гамильтонианов  $H_s$ , а операторный множитель Больцмана — просто произведение операторных множителей  $\rho_s$ . Следовательно, правая часть формулы (3.46) для строго гармонического кристалла разбивается на произведение ряда отдельных множителей, каждый из которых относится к одному своему нормальному колебанию, т. е.

$$\langle e^{-i(E_\gamma - E_0)t/\hbar} \rangle = \prod_s \text{Sp}(\rho_s e^{i\mathbf{a}_{Ls} \xi_s} e^{iH_s t/\hbar} e^{-i\mathbf{a}_{Ls} \xi_s} e^{-iH_s t/\hbar}) \quad (3.69)$$

Отдельный множитель в (3.69) имеет в точности вид, даваемый формулой (3.46) для одного осциллятора. Значит, мы можем сразу применить к рассматриваемому случаю (строго гармонического кристалла) формулу (3.656), просто заменив в ней  $x$  на  $\xi_s$ ,  $\omega$  на  $\omega_s$ ,  $k$  на  $k_{Ls}$  и  $R$  на величину

$$R_s = \frac{\hbar^2 a_{Ls}^2 k^2}{2M}. \quad (3.70)$$

Тогда получим следующую формулу:

$$\langle e^{-i(E_\gamma - E_0)t/\hbar} \rangle = \prod_s \exp(-\langle k^2 a_{Ls}^2 \tau_{ss}^2 \rangle) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} I_n \left[ \frac{R_s}{\hbar\omega_s \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega_s \beta \right)} \right] \times \\ \times e^{-\frac{1}{2} n \hbar\omega_s \beta} e^{-in\omega_s t} = \quad (3.71a)$$

$$= e^{-\langle (k \cdot x_L)^2 \rangle} \sum_{\text{по всем } \{n_s\}} \left[ \prod_s I_{n_s} \left\{ \frac{R_s}{\hbar\omega_s \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega_s \beta \right)} \right\} \right] \times \\ \times e^{-\frac{1}{2} \sum_s n_s \hbar\omega_s \beta} e^{-i \sum_s n_s \omega_s t} \quad (3.71b)$$

Как видим, спектр энергий излученных  $\gamma$ -квантов для гармонического кристалла значительно сложнее спектра для одного гармонического осциллятора. Каждая величина  $n_s$  отвечает изменению энергии соответствующего  $s$ -го нормального колебания кристаллической решетки, и каждый набор  $3N$  величин  $\{n_s\}$  определяет величину энергии  $\sum_s \hbar\omega_s n_s$ , переданной кристаллу при испускании излучающим ядром  $\gamma$ -кванта. В формуле (3.71б) соответствующие слагаемые выписаны явно. Если состояние кристалла не изменяется после излучения  $\gamma$ -кванта, то  $n_s = 0$  для всех  $s$ , и мы получаем формулу, представляющую собой обобщение формулы (3.66б):

$$P(0) = e^{-\langle (k \cdot x_L)^2 \rangle} \prod_s I_0 \left( \frac{R_s}{\hbar\omega_s \operatorname{sh} \left( \frac{1}{2} \hbar\omega_s \beta \right)} \right). \quad (3.72)$$

Так как  $R_s$  совпадает по порядку величины с  $a_{sL}^2$ , т. е. имеет порядок  $(3N)^{-1}$ , то функцию Бесселя в (3.72) можно разложить. Первый член разложения — это в точности формула (3.31) (которую нестрого мы получили выше):

$$P(E_0, T) = \exp \{ -\langle (k \cdot x_L)^2 \rangle_T \}. \quad (3.34)$$

Ошибка имеет порядок  $(3N)^{-1}$ , так как следующие члены разложения квадратичны по  $R_s$ , т. е. имеют порядок  $(3N)^{-2}$ , а всего имеется  $3N$  таких членов.

Другие характерные особенности спектра энергий излученных  $\gamma$ -квантов можно установить, либо численно обчислив формулу (3.71б), либо используя для ее преобразования различные приближения. Одно из возможных приближений основано на классификации отдельных слагаемых в (3.71б) по «числу возбужденных фононов». Рассмотренное выше слагаемое с  $n_s = 0$  при всех  $s$  называют «бесфононным слагаемым». В «однофононных» слагае-



ных  $n_s = \pm 1$  для одного какого-то значения  $s$ , а все остальные  $n_s = 0$ . В «двухфононных» слагаемых  $n_s = \pm 1$  для двух различных  $s$  и т. д.

Отметим, что для гармонического кристалла, у которого имеется одно-единственное нормальное колебание с  $a_{Ls} \approx 1$ , может оказаться важной поправка к общей формуле (3.31), возникающая от учета следующего члена в разложении функции Бесселя. Этот случай мог бы встретиться на практике, когда источником  $\gamma$ -излучения служит примесное атомное ядро, и доминирующим нормальным колебанием оказывается «локализованное» колебание примесного ядра, находящегося в потенциальной яме, созданной остальными ядрами кристалла (при этом движение примесного ядра слабо коррелирует с движением остальных атомных ядер). Однако случаев, когда функция Бесселя вносила бы существенные поправки в фактор Дебая — Валлера, пока не обнаружено. В следующем параграфе мы покажем, что релаксационные эффекты <sup>1)</sup> подавляют влияние функции Бесселя. Таким образом, возможно, его никогда нельзя будет обнаружить экспериментально.

### § 8. Температурный сдвиг и релаксационные эффекты

Формулу (2.51) для температурного сдвига (доплеровского смещения второго порядка) легко обобщить на рассматриваемый нами случай гармонического кристалла. Снова можно непосредственно применить формулы теории возмущений и получить сдвиг, выраженный через среднюю кинетическую энергию, или через средний квадрат скорости, или через квадрат импульса ядра, излучающего  $\gamma$ -квант.

В случае системы в состоянии термодинамического равновесия мы сталкиваемся со следующей трудностью. Система находится не в чистом квантовом состоянии, а в статистически смешанном квантовом состоянии. Для каждой компоненты смеси температурный сдвиг различен, так как различны величины  $\langle E_{\text{кин}} \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  и  $\langle v^2 \rangle$  для разных чистых состояний, составляющих смесь. Означает ли это, что мессбауэровская линия расщепится на линии-компоненты с различными температурными сдвигами или же будет наблюдаться одна линия с каким-то одним температурным сдвигом, величину которого можно найти, взяв усредненную по распределению Больцмана величину теоретического температурного сдвига каждой линии-компоненты?

<sup>1)</sup> То есть эффекты, связанные с конечным временем установления состояния термодинамического равновесия. — Прим. перев.

Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим сначала одно ядро, движущееся в потенциале гармонического осциллятора и находящееся в состоянии термодинамического равновесия. Если в течение того времени, пока ядро излучает  $\gamma$ -квант, оно находится во вполне определенном квантовом состоянии, то температурный сдвиг энергии  $\gamma$ -кванта будет иметь вполне определенную величину, которая находится по формуле (2.51). Рассмотрим теперь большое число таких излучающих ядер, каждое из которых в интервалы времени излучения каждого  $\gamma$ -кванта находится во вполне определенном квантовом состоянии, но будем считать, что вероятность обнаружить отдельное излучающее ядро в заданном состоянии имеет больцмановское распределение. В этом случае энергия каждого излученного  $\gamma$ -кванта будет иметь вполне определенный температурный сдвиг, отвечающий какому-то начальному состоянию  $|n'\rangle$ , и тогда вместо одной мессбауэровской линии будет наблюдаться несколько линий-компонент, причем интенсивность каждой линии-компоненты будет пропорциональна множителю Больцмана для соответствующего начального состояния.

Здесь, однако, возникает вопрос, сколь мало или велико время установления нарушенного теплового равновесия. Наш осциллятор ведь как-то динамически связан с термостатом, имеющим температуру  $T$ , и должен постоянно обмениваться с ним энергией для поддержания своего теплового равновесия. Так как он действительно обменивается с ним энергией, то его уже нельзя считать невзаимодействующим с термостатом даже в том случае, когда он до и после излучения  $\gamma$ -кванта будет находиться в одном и том же квантовом состоянии. Осциллятор может блуждать по квантовым состояниям в течение интервала времени, пока происходит излучение  $\gamma$ -кванта, и возникает вопрос: как это может сказаться на температурном сдвиге энергии излученного  $\gamma$ -кванта?

Чтобы лучше разобраться с этим вопросом, рассмотрим «комбинированную» систему, составленную из ядра, движущегося в потенциале гармонического осциллятора, и слабо связанного с ним *термостата*, который мы будем считать очень большой динамической квантовой системой, обладающей большим числом степеней свободы. Сначала рассмотрим ситуацию, когда между нашим колеблющимся ядром и термостатом взаимодействие выключено. Обозначим через  $|n'\alpha'\rangle$  полный набор стационарных состояний всей системы, где  $\alpha'$  обозначает полный набор квантовых чисел, характеризующих отдельное собственное состояние гамльтониана, описывающего термостат. Собственные состояния полного гамльтониана невзаимодействующей комбинированной системы будут очень сильно вырожденными, так как большая система обладает большим числом степеней свободы, и любые два состояния  $|n', \alpha'\rangle$  и  $|n'', \alpha''\rangle$  будут иметь одинаковые энергии,

если энергии состояний термостата  $\alpha'$  и  $\alpha''$  удовлетворяют соотношению  $E_{\alpha''} - E_{\alpha'} = (n' - n'') \hbar\omega$ .

Рассмотрим теперь ситуацию, когда имеется очень слабое взаимодействие между колеблющимся ядром и термостатом; пусть оно настолько мало, что его можно учесть, ограничиваясь лишь первым порядком «вырожденной» теории возмущений. Собственные состояния первого порядка комбинированной системы являются линейными комбинациями соответствующих вырожденных состояний невозмущенной комбинированной системы, т. е.

$$|\xi\rangle = \sum_{n'\alpha'} C_{n'\alpha'}^{(\xi)} |n'\alpha'\rangle; \quad (3.73)$$

здесь коэффициенты  $C_{n'\alpha'}^{(\xi)}$  определяются путем процедуры диагонализации гамильтониана взаимодействия полной комбинированной системы на подпространстве вырожденных невозмущенных состояний.

Рассмотрим излучение мессбауэровского  $\gamma$ -кванта ядром, находящимся в состоянии  $|\xi\rangle$  [см. (3.73)]. Вероятность того, что полная система после излучения  $\gamma$ -кванта останется в своем начальном состоянии, вычисляется по формуле, которая получается путем подстановки (3.73) в (3.8):

$$P_{\xi \rightarrow \xi} = |\langle \xi | e^{-ikx} | \xi \rangle|^2 = \left| \sum_{n''\alpha''} C_{n''\alpha''}^{(\xi)*} C_{n''\alpha''}^{(\xi)} \langle n''\alpha'' | e^{-ikx} | n''\alpha'' \rangle \right|^2. \quad (3.74)$$

Так как оператор  $e^{-ikx}$  действует только на переменные, описывающие излучающее ядро, движущееся в осцилляторном потенциале, и не действует на переменные термостата, то матричные элементы этого оператора не обращаются в нуль лишь при условии, если  $\alpha' = \alpha''$ . Но когда  $\alpha' = \alpha''$ , тогда  $n'$  и  $n''$  тоже должны совпадать, так как все состояния, входящие в линейную комбинацию (3.73), обладают одинаковой невозмущенной энергией. Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} \langle n'\alpha' | e^{-ikx} | n''\alpha'' \rangle &= \langle n' | e^{-ikx} | n'' \rangle \delta_{\alpha'\alpha''} = \\ &= \langle n' | e^{-ikx} | n' \rangle \delta_{n'n''} \delta_{\alpha'\alpha''} \end{aligned} \quad (3.75)$$

и поэтому

$$P_{\xi \rightarrow \xi} = \left| \sum_{n'} \sum_{\alpha'} |C_{n'\alpha'}^{(\xi)}|^2 \langle n' | e^{-ikx} | n' \rangle \right|^2, \quad (3.76)$$

причем последнюю формулу можно также записать в виде

$$P_{\xi \rightarrow \xi} = \left| \sum_{n'} \langle n' | e^{-ikx} | n' \rangle p_n^{(\xi)} \right|^2, \quad (3.77a)$$

где

$$p_n^{(\xi)} = \sum_{\alpha'} |C_{n'\alpha'}^{(\xi)}|^2; \quad (3.77b)$$

формула (3.77б) дает вероятность найти колеблющееся ядро в состоянии  $|n'\rangle$  при условии, что комбинированная система находится в состоянии  $|\xi\rangle$ . Формула (3.77) очень похожа на формулу (3.38), полученную для статистически смешанного состояния, однако эти две формулы имеют существенное различие. В формуле (3.77) матричный элемент усредняется по распределению вероятностей до возведения его в квадрат, в то время как в формуле (3.38) усредняется *квадрат* матричного элемента.

Прежде чем проводить вычисления по формуле (3.77), обсудим некоторые свойства статистически смешанного состояния комбинированной системы, находящейся в тепловом равновесии при температуре  $T$ . В таком состоянии на одну степень свободы приходится в среднем энергия  $kT$ ; при низких температурах, впрочем, нужно учитывать квантовые поправки. Полная энергия комбинированной системы в состоянии термодинамического равновесия равна по порядку величины  $NkT$ , где  $N$  — число степеней свободы. Размытие энергии комбинированной системы по ансамблю имеет величину порядка  $N^{1/2}kT$ . Следовательно, размытие, отнесенное к одной степени свободы, равно  $N^{-1/2}kT$ , т. е. оно пренебрежимо мало. Таким образом, термодинамически равновесное (статистически смешанное) состояние комбинированной системы состоит из очень большого числа чистых квантовых состояний, энергии которых с высокой степенью точности одинаковы.

Рассмотренное выше конкретное состояние  $|\xi\rangle$  взаимодействующей комбинированной системы представляет собой линейную комбинацию очень большого числа вырожденных собственных состояний невозмущенной комбинированной системы. Так как число состояний  $\alpha'$ , входящих в сумму (3.73), велико, значения вероятностей  $p_n^{(\xi)}$  можно найти, используя чисто статистические соображения, т. е. считая, что значения  $p_n^{(\xi)}$  одинаковы для всех состояний  $|\xi\rangle$ , имеющих одинаковую энергию. Следовательно, вероятности  $p_n^{(\xi)}$  просто даются больцмановскими множителями, соответствующими той температуре, при которой полная энергия системы равна энергии состояния  $|\xi\rangle$ . Таким образом, формула (3.77) справедлива и для термодинамически равновесного (статистически смешанного) состояния, так как величины  $p_n^{(\xi)}$  одинаковы для всех состояний этой «смеси».

В формулу (3.77) входит квадрат среднего значения матричного элемента гармонического осциллятора по термодинамически равновесному состоянию, причем это среднее значение имеет вид (3.59). Его можно рассчитать непосредственно, используя формулу (3.59), и получить в результате  $\exp(-k^2 \langle x^2 \rangle)$  [без дополнительного множителя, содержащего функцию Бесселя и появляющегося в формуле (3.66б)].

Температурный сдвиг для состояния  $|\xi\rangle$  можно вычислить по формуле (2.51), подставив в нее состояние  $|\xi\rangle$ . Величина сдвига зависит только от величины среднего значения кинетической энергии по бальцмановскому распределению, и, таким образом, для системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия, мы получаем *одну нерасщепленную мессбауэровскую линию*.

Однако, придя к этому результату, мы все же не ответили на сформулированный в начале данного параграфа вопрос о том, *мало или велико время установления нарушенного теплового равновесия*. Мы, скорее, хитро обошли его. Ведь формула (3.74) не определяет, вообще говоря, интенсивность наблюдаемой мессбауэровской линии, так как начальное состояние не обязательно должно совпадать с конечным, что вообще редко бывает. Существенно, разумеется, лишь то, что оба состояния обладают одинаковой энергией. Для колеблющегося ядра, не взаимодействующего с термостатом, случайное вырождение его состояний не играет никакой роли, так как структура всех вырожденных состояний, вообще говоря, очень сильно отличается от структуры начального состояния, и поэтому матричный элемент оператора  $e^{-ikx}$ , взятый между каждым таким состоянием и начальным состоянием, очень мал. Однако для нашей комбинированной системы с включенным взаимодействием между колеблющимся ядром и термостатом ситуация другая, так как теперь из-за взаимодействия заданное состояние осциллятора примешивается к большому числу состояний комбинированной системы и все полученные таким образом состояния имеют сходную структуру

Вероятность  $P(E_0, \xi)$  того, что будет излучен  $\gamma$ -квант с энергией  $E_0$  полной взаимодействующей комбинированной системой, первоначально находящейся в состоянии  $|\xi\rangle$ , дается формулой

$$P(E_0, \xi) = \sum_{\xi'} |\langle \xi' | e^{-ikx} | \xi \rangle|^2, \quad (3.78a)$$

в которой суммирование проводится по подпространству (обозначаемому буквой  $\xi$ ) всех состояний  $|\xi'\rangle$ , вырожденных с состоянием  $|\xi\rangle$ . Таким образом, среднее значение выражения, стоящего в правой части (3.78a) (по всем состояниям подпространства  $\xi$ ), дается следом матрицы на данном подпространстве:

$$\langle P(E_0, \xi) \rangle_{\xi} = (N_{\xi})^{-1} \text{Sp}_{\xi} \{ (e^{ikx})_{\xi} (e^{-ikx})_{\xi} \}, \quad (3.78b)$$

где  $N_{\xi}$  — полное число состояний в этом вырожденном подпространстве,  $(e^{ikx})_{\xi}$  — матрицы, рассматриваемые на нем, и  $\text{Sp}_{\xi}$  — след на данном подпространстве.

Предположим теперь, что взаимодействие между колеблющимся ядром и термостатом настолько мало, что состояния, которые были вырождены в отсутствие взаимодействия, остаются приближенно вырожденными и после включения взаимодействия

(т. е. все равно составляют подпространство  $\xi$ ). Так как след в формуле (3.78б) не меняется при унитарных преобразованиях базисных состояний рассматриваемого подпространства, то в качестве базиса при вычислении следа мы вместо состояний  $|\xi\rangle$  можем взять более простые состояния  $|n'\alpha'\rangle$ . Тогда получим

$$\begin{aligned} \langle P(E_0, \xi) \rangle_{\xi} &= (N_{\xi})^{-1} \sum_{n'\alpha', n''\alpha''} \langle n'\alpha' | e^{i\hbar x} | n''\alpha'' \rangle \langle n''\alpha'' | e^{-i\hbar x} | n'\alpha' \rangle = \\ &= (N_{\xi})^{-1} \sum_{n'\alpha'} |\langle n'\alpha' | e^{-i\hbar x} | n'\alpha' \rangle|^2, \quad (3.79) \end{aligned}$$

причем при написании второго равенства мы использовали формулу (3.75).

Формула (3.74) в точности совпадает с формулой (3.38), выведенной нами ранее для статистически смешанного состояния. Матричный элемент *сначала* возводится в квадрат, и только *затем* производится усреднение результата по термодинамически равносному состоянию. Поэтому формула (3.79) содержит, как и формула (3.66б), в качестве дополнительного множителя функцию Бесселя, причем эта функция Бесселя имеет значения всегда больше единицы; причина соответствующего увеличения вероятности — вклад, происходящий от учета конечных состояний  $|\xi'\rangle \neq |\xi\rangle$  в формуле (3.78а).

Ответ на вопрос о том, какая из двух формул [(3.74) или (3.78)] дает правильный результат, зависит от того, можно ли считать все состояния  $|n'\alpha'\rangle$  (вырожденные друг с другом в отсутствие взаимодействия в комбинированной системе, составленной из колеблющегося ядра и термостата) по-прежнему вырожденными и при включении взаимодействия или нет; другими словами, велико ли расщепление энергий этих состояний за счет взаимодействия по сравнению с естественной шириной линии излучаемого  $\gamma$ -кванта. Если это расщепление невелико, то справедлива формула (3.78) и функцию Бесселя обязательно нужно учитывать, как и в формуле (3.66б). Если же расщепление велико, то применима формула (3.74) и множитель с функцией Бесселя надо отбросить.

Вопрос о соотношении величины энергии расщепления и естественной ширины линии можно обсудить иначе, если обратиться к характерным *временам*; время — это переменная, канонически сопряженная с энергией. Предположим, что система в момент времени  $t = 0$  до излучения ею  $\gamma$ -кванта находилась в определенном состоянии  $|n'\alpha'\rangle$ . Это состояние, конечно, можно разложить по собственным функциям  $|\xi'\rangle$  системы с учетом взаимодействия и получить формулу

$$|n'\alpha'\rangle = \sum_{\xi'} C_{n'\alpha'}^{(\xi')} | \xi' \rangle. \quad (3.80a)$$

В какой-то более поздний момент времени  $t$  система будет находиться в состоянии

$$e^{-iHt/\hbar} |n'\alpha'\rangle = \sum_{\xi'} e^{-iE't/\hbar} C_{n'\alpha'}^{(\xi')*} |\xi'\rangle, \quad (3.80б)$$

где  $E'$  — собственное значение гамильтониана  $H$ , соответствующее собственному состоянию  $|\xi'\rangle$ .

По мере возрастания времени отдельные состояния в волновом пакете (3.80б) перестают быть в фазе друг с другом, и система больше не будет находиться в состоянии  $|n'\alpha'\rangle$ . Чтобы оценить «время жизни», или время расплывания, начального состояния, рассмотрим величину перекрытия состояния (3.80б) с начальным состоянием (3.80а) в зависимости от времени:

$$\langle n'\alpha' | e^{-iHt/\hbar} |n'\alpha'\rangle = e^{-i\bar{E}t/\hbar} \sum_{\xi'} |C_{n'\alpha'}^{(\xi')}|^2 e^{-i(E' - \bar{E})t/\hbar}, \quad (3.81а)$$

где  $\bar{E}$  — средняя энергия пакета, т. е. энергия

$$\bar{E} = \sum_{\xi'} |C_{n'\alpha'}^{(\xi')}|^2 E'. \quad (3.81б)$$

Разлагая в (3.81а) экспоненциальный оператор в ряд по малым  $t$ , получаем

$$\langle n'\alpha' | e^{-iHt/\hbar} |n'\alpha'\rangle \approx e^{-i\bar{E}t/\hbar} [1 - |C_{n'\alpha'}^{(\xi')}|^2 (E' - \bar{E})^2 t^2/\hbar^2], \quad (3.82а)$$

$$\approx e^{-i\bar{E}t/\hbar} [1 - (\Delta E)^2 t^2/\hbar^2], \quad (3.82б)$$

где  $(\Delta E)^2$  определяется формулой

$$(\Delta E)^2 \equiv \sum_{\xi'} |C_{n'\alpha'}^{(\xi')}|^2 (E' - \bar{E})^2. \quad (3.82в)$$

Энергия  $\Delta E$  характеризует величину энергетического расщепления вырожденных состояний, происходящего при включении взаимодействия колеблющегося ядра с термостатом. Из формул (3.82) следует, что если система в начальный момент времени  $t = 0$  находилась в состоянии  $|n'\alpha'\rangle$ , то вероятность обнаружить ее в этом состоянии по истечении времени  $t$ , малом по сравнению с  $\hbar/\Delta E$ , будет большой, а вероятность обнаружить ее в этом состоянии через промежуток времени  $t$ , большой по сравнению с  $\hbar/\Delta E$ , будет очень малой. Таким образом, величина  $\hbar/\Delta E$  определяет «время релаксации», или время установления нарушенного теплового равновесия, которое целиком характеризуется величиной взаимодействия между рассматриваемым колеблющимся ядром и термостатом.

Мы уже убедились, что обычная формула (3.38) для вероятности излучения  $\gamma$ -кванта статистически смешанным состоянием остается справедливой, когда расщепление  $\Delta E$  настолько мало

по сравнению с естественной шириной  $\Gamma$  линии ядерного  $\gamma$ -излучения, что им вообще можно пренебречь. Это означает, что время релаксации  $\hbar/\Delta E$  велико по сравнению с временем жизни  $\hbar/\Gamma$  возбужденного ядерного состояния, которое излучает  $\gamma$ -квант. Формула (3.74), напротив, применима только тогда, когда время релаксации мало по сравнению с временем жизни ядерного состояния. Физический смысл такого вывода очень прост. Когда время релаксации велико по сравнению с временем жизни состояния ядра, ядро при излучении  $\gamma$ -кванта остается в прежнем состоянии  $|n'\rangle$  осцилляторного потенциала. Когда же время релаксации мало, ядро за время, пока оно излучает  $\gamma$ -квант, будет совершать квантовые прыжки из одного осцилляторного состояния в другое. В первом случае оказывается справедливой формула (3.38) для статистически смешанного состояния, так как излучение всегда будет происходить из вполне определенного осцилляторного состояния. (Усреднение при этом должно вестись по переходам из различных начальных осцилляторных состояний.) Во втором случае применима формула (3.77), так как ядро во время излучения им  $\gamma$ -кванта *не* будет находиться в каком-то одном определенном осцилляторном состоянии. (Здесь нужно вести усреднение самого матричного элемента для каждого *отдельного* перехода.)

Разобранный пример показывает, насколько важную роль играет время релаксации, т. е. характерное время установления нарушенного теплового равновесия. Вероятность излучения мессбауэровского  $\gamma$ -кванта системой, находящейся в состоянии теплового равновесия, зависит от того, велико или мало это время по сравнению с временем жизни возбужденного состояния колеблющегося ядра. Если время релаксации мало, то нужно сначала произвести усреднение матричного элемента для каждого отдельного перехода и только затем результат возвести в квадрат. Если же время релаксации велико, то нужно сначала матричный элемент возвести в квадрат и лишь затем произвести усреднение по переходам.

Эти соображения в полной мере относятся к температурному сдвигу мессбауэровской линии. Если время релаксации мало, то имеется один температурный сдвиг, который дает одну линию, причем величина сдвига определяется средним по распределению Больцмана значением кинетической энергии излучающего ядра. Если время релаксации велико, то будет много температурных сдвигов различной величины, соответствующих разным начальным состояниям, и либо произойдет расщепление линии на несколько линий-компонент, либо будет наблюдаться уширение линии. Указанные соображения применимы ко многим релаксационным явлениям, в которых могут происходить с разной скоростью переходы между расщепленными уровнями. При больших



временах релаксации наблюдается расщепление линии перехода, так как каждый переход четко выражен; при этом спектр воспроизводит расщепление энергий состояний. При малых временах релаксации наблюдается всегда лишь одна линия, размазанная с естественной шириной; ее положение определяется энергетическим положением центра тяжести расщепленных энергий.

В реальном кристалле тепловое равновесие устанавливается за счет взаимодействия между различными нормальными колебаниями кристаллической решетки, которым в гармоническом приближении полностью пренебрегают. Время релаксации, характерное для такого взаимодействия, определяется средним «временем жизни» фонона в кристалле, т. е. тем временем, в течение которого существует данное нормальное колебание решетки, прежде чем оно «рассеется», или «диссипирует», в другие нормальные колебания. Это среднее время жизни отдельного фонона мало по сравнению с характерными временами жизни возбужденного состояния колеблющегося ядра, из которого происходит  $\gamma$ -излучение. На практике применима почти всегда обычная формула для фактора Дебая — Валлера, т. е. формула (3.31), не включающая множитель с функцией Бесселя, и температурный сдвиг дает одну четко выраженную линию, имеющую естественную ширину.

## Глава 4. ЭФФЕКТ МЕССБАУЭРА И ПЕРЕДАЧА ИМПУЛЬСА СВЯЗАННОЙ СИСТЕМЕ

### § 1. Мессбауэровское излучение свободным ядром

В гл. 2 и 3, посвященных эффекту Мессбауэра, мы рассматривали только следствия самого факта передачи импульса ядру. Теперь рассмотрим, как происходит процесс излучения  $\gamma$ -кванта ядром. Для полного изучения вопроса требуется применить квантовую теорию излучения (квантовую теорию электромагнитного поля), однако мы пойдем по пути упрощения и построим феноменологический гамильтониан, описывающий все существенные черты процесса излучения, и используем операторы вторичного квантования и законы сохранения<sup>1)</sup>.

Обозначим через  $a_{ke}^\dagger$  оператор рождения ядра в его внутреннем возбужденном состоянии  $e$  с импульсом центра масс ядра  $\hbar k$ , а через  $a_{kg}^\dagger$  — оператор рождения ядра в его внутреннем основном состоянии  $g$  с импульсом  $\hbar k$ . Помимо основного состояния и того возбужденного состояния, с которого происходит излучение мессбауэровского  $\gamma$ -кванта, ядро, конечно, имеет много других состояний, и их нужно учитывать, так как операторы рождения должны быть определены для *полного* набора состояний. Однако интерес для нас сейчас представляет лишь одно возбужденное состояние, а именно то, с которого происходит излучение  $\gamma$ -кванта. Поэтому мы можем отвлечься от существования остальных возбужденных состояний нашего ядра и считать, что внутренние степени свободы его таковы, что они допускают только два состояния: *основное* и определенное *возбужденное* состояние.

Обозначим через  $b_{ks}^\dagger$  оператор рождения фотона в состоянии с волновым вектором  $k$  и поляризацией  $s$ . Два состояния поляризации фотона не играют сейчас для нас никакой роли и вводятся просто для полноты описания. Индекс  $s$ , таким образом, может принимать два значения, соответствующие либо поляризациям в горизонтальном и вертикальном направлениях, либо левой и правой круговым поляризациям, либо двум любым другим ортогональным состояниям поляризации. В интересующих нас физических эффектах, однако, не нужна поляризация фотона, и поэтому

<sup>1)</sup> Такая процедура рассмотрения обычно используется в теории твердого тела и в физике элементарных частиц, когда невозможно или бессмысленно строить гамильтониан из первых принципов. См., например, гл. 7.

по индексу  $s$  мы всегда будем проводить суммирование (так что не важно, какой именно базис для поляризации мы выберем).

Мы рассмотрим сначала систему, состоящую из свободных фотонов и свободных ядер, причем предположим на мгновение, что ядра не могут поглощать или излучать фотоны, т. е. что ядра и фотоны не взаимодействуют. Гамильтониан такой невзаимодействующей системы имеет вид

$$H_0 = \sum_{ks} (\hbar kc) b_{ks}^\dagger b_{ks} + \sum_k E_{ke} a_{ke}^\dagger a_{ke} + \sum_k E_{kg} a_{kg}^\dagger a_{kg}, \quad (4.1)$$

где  $\hbar kc$  — энергия фотона с волновым вектором  $k$ , а  $E_{ke}$  и  $E_{kg}$  — энергии соответственно возбужденного и основного состояний ядра с полным импульсом  $\hbar k$ . Так как энергии  $E_{ke}$  и  $E_{kg}$  входят в гамильтониан просто как параметры, то все наше рассмотрение можно провести, не уточняя их конкретного вида. При последующем использовании полученных в такой теории формул вместо параметров  $E_{ke}$  и  $E_{kg}$  можно подставить либо точные релятивистские значения этих энергий (с учетом релятивистской разности масс основного и возбужденного состояний), либо любые соответствующие приближенные значения.

Теперь включим в гамильтониан (4.1) взаимодействие, описывающее переход ядер нашей системы из возбужденного состояния в основное с излучением  $\gamma$ -кванта. Если мы потребуем, чтобы импульс при таком переходе сохранялся, то должны будем включить в оператор взаимодействия слагаемые вида

$$a_{k-q}^\dagger g a_{ke} b_{qs}^\dagger,$$

каждое из которых описывает элементарный акт излучения фотона с импульсом  $\hbar q$  ядром, первоначально имеющим импульс центра масс  $\hbar k$  и находящимся в возбужденном состоянии, а затем переходящим в основное состояние с полным импульсом центра масс  $\hbar(k-q)$ . Оператор взаимодействия наиболее общего вида должен включать сумму членов указанного типа, т. е. должен иметь вид

$$H_{\text{int}} = \sum_{kqs} C_{kqs} a_{k-q}^\dagger g a_{ke} b_{qs}^\dagger + \text{эрмит. сопр.}, \quad (4.2)$$

где  $C_{kqs}$  — некоторые коэффициенты, которые будем называть «коэффициентами взаимодействия» и зависимость которых от индексов пока не будем уточнять. Требование эрмитовости гамильтониана приводит к добавлению эрмитово сопряженных членов, описывающих обратные переходы ядра из основного состояния в возбужденное с поглощением фотона.

Рассмотрим теперь состояние невзаимодействующей системы, в котором имеется только одно ядро с импульсом  $\hbar k$ , находящееся

в возбужденном состоянии, и нет никаких фотонов:

$$|i\rangle = a_{ke}^\dagger |0\rangle. \quad (4.3)$$

Полный гамильтониан нашей системы есть сумма гамильтонианов (4.1) и (4.2). Считая состояние (4.3) начальным состоянием системы, вычислим вероятность квантового перехода системы из этого состояния в любое другое состояние с помощью временной теории возмущений. Представляющие для нас интерес конечные состояния имеют следующий вид:

$$|f_s\rangle = b_{qs}^\dagger a_{k-q, g}^\dagger |0\rangle, \quad (4.4)$$

где абсолютная величина импульса  $q$  должна быть найдена из закона сохранения энергии, что непосредственно следует из временной теории возмущений, т. е.

$$\hbar c q = E_{ke} - E_{|k-q|, g}. \quad (4.5)$$

Эффект энергии отдачи ядра, приводящий к уменьшению энергии излученного фотона, проявляется в том, что в правой части (4.5) мы имеем разность энергий состояний ядра с импульсами  $\hbar k$  и  $\hbar(k - q)$  соответственно. Согласно (4.5), энергия фотона при заданном угле между  $k$  и  $q$  имеет одно вполне определенное значение. (Конечно, этот угол принимает любые значения.) Вероятность перехода в единицу времени из состояния  $i$  в состояние  $f_s$  можно найти, пользуясь обычной формулой «золотого правила» из временной теории возмущений. Для этой вероятности имеем

$$W_{i \rightarrow f_s}^F = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f_s | H_{\text{int}} | i \rangle|^2 \rho_f = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{kqs}|^2 \rho_f. \quad (4.6)$$

Здесь  $\rho_f$  — «энергетическая плотность» конечных состояний системы. Мы добавили верхний индекс F, чтобы отметить, что имеем дело со случаем свободного ядра, и тем самым отличить рассматриваемый случай от случая мессбауэровского излучения  $\gamma$ -кванта связанным ядром, который будет обсуждаться в § 2 настоящей главы. Полная вероятность перехода получается путем суммирования (4.6) по обоим состояниям поляризации  $s$  и по импульсам фотона  $q$ , удовлетворяющим закону сохранения энергии (4.5). Суммирование по  $q$  при этом фактически сводится к интегрированию по углу между векторами  $k$  и  $q$ .

Интересно обобщить наше рассмотрение на тот случай, когда в начальном состоянии присутствуют фотоны. Рассмотрим начальное состояние невзаимодействующей системы, в котором, помимо возбужденного ядра, имеется  $n$  фотонов в некотором состоянии

с поляризацией  $s$  и волновым вектором, равным волновому вектору  $q$ :

$$|i_n\rangle = (n!)^{-1/2} (b_{qs}^\dagger)^n a_{ke}^\dagger |0\rangle. \quad (4.7)$$

Соответствующее конечное состояние при этом имеет следующий вид:

$$|f_{ns}\rangle = [(n+1)!]^{-1/2} (b_{qs}^\dagger)^{n+1} a_{k-g}^\dagger |0\rangle. \quad (4.8)$$

Если состояния (4.7) и (4.8) подставить в формулу «золотого правила» (4.6) для вероятности перехода в единицу времени, то легко убедиться, что получается матричный элемент, входящий в формулу (4.6), но умноженный на следующий дополнительный множитель:

$$|\langle 0 | (b_{qs})^{n+1} (b_{qs}^\dagger)^{n+1} | 0 \rangle [(n+1)! n!]^{-1/2}|^2 = n+1. \quad (4.9)$$

Таким образом, если в начальный момент в системе есть  $n$  фотонов соответствующей энергии, то вероятность излучения ядром  $\gamma$ -кванта увеличивается в  $n+1$  раз. Такое «стимулированное» испускание фотонов является прямым следствием бозе-статистики (или просто коммутационных соотношений бозонных фотонных операторов). Чтобы его понять, как мы видим, вовсе не нужно знать полной квантовой теории излучения. В теории эффекта Мессбауэра, однако, указанное стимулированное испускание до сих пор не представляло никакого интереса, и мы заговорили здесь о нем только потому, что было важно сделать это отступление. Стимулированное испускание фотонов, конечно, важно в других приложениях квантовой физики; в частности, именно оно лежит в основе физики действия мазеров и лазеров.

Выше мы взяли гамильтониан взаимодействия (4.2) наиболее общего вида, выписанный только с учетом требований закона сохранения импульса. Коэффициенты взаимодействия  $C_{kqs}$  в нем могут поэтому зависеть от индексов совершенно произвольным образом. В формулу для вероятности перехода (4.6) входят как раз эти коэффициенты, и поэтому, как зависит вероятность перехода от импульсов  $k$  и  $q$ , поляризации  $s$ , пока нам неизвестно. Мы знаем только, что  $k$  и  $q$  должны удовлетворять ограничению, налагаемому законом сохранения энергии (4.5).

При построении феноменологических гамильтонианов взаимодействия типа гамильтониана (4.2) следует всегда использовать как можно больше соображений или принципов инвариантности и симметрии с тем, чтобы ограничить возможные значения параметров, входящих в феноменологический гамильтониан. Мы уже использовали закон сохранения импульса. Посмотрим теперь, что дает релятивистская инвариантность. Обычно мы имеем дело с ядрами, скорость которых очень мала по сравнению со скоростью света. Поэтому мы можем использовать не принцип Лоренца,

а принцип Галилея и потребовать, чтобы взаимодействие (4.2) никак не изменялось при переходе к новой системе координат, движущейся с малой скоростью  $v$  относительно исходной; это позволяет пренебречь всеми малыми членами порядка  $v/c$ . Посмотрим, как влияет такое преобразование от одной системы отсчета к другой на вид гамильтониана взаимодействия (4.2). Импульс фотона  $q$  и его поляризация  $s$  при переходе к новой системе отсчета не меняются, так как доплеровское изменение импульса имеет порядок  $v/c$ . С другой стороны, начальный импульс ядра  $\hbar k$  меняется значительно, так как начальная скорость ядра может быть много меньше скорости  $v$  движения новой системы отсчета относительно старой, хотя, конечно, будет удовлетворяться условию  $v \ll c$ . Значит, если коэффициенты  $C_{kqs}$  будут зависеть от начального импульса  $\hbar k$ , то гамильтониан (4.2) не будет инвариантным при преобразованиях Галилея. Следовательно, условием инвариантности гамильтониана относительно преобразования Галилея является *условие независимости*  $C_{kqs}$  от  $k$ . Или, в более общей формулировке, можно сказать, что принцип инвариантности Лоренца требует, чтобы коэффициенты  $C_{kqs}$  не зависели от  $k$  с точностью до членов порядка  $v/c$ .

Физический смысл этого требования заключается просто в том, что в нерелятивистском пределе вероятность (4.6)  $\gamma$ -распада ядра не должна зависеть от скорости движения наблюдателя относительно этого излучающего ядра, т. е. от величины импульса ядра  $\hbar k$  в любой выбранной системе отсчета. Все релятивистские поправки в  $C_{kqs}$  можно легко учесть, потребовав, чтобы зависимость  $C_{kqs}$  от  $k$  правильно отражала релятивистскую зависимость вероятности распада состояния (или его времени жизни) от скорости движения ядра относительно наблюдателя, т. е. чтобы эта зависимость приводила к релятивистскому эффекту замедления времени.

Рассмотрим теперь зависимость  $C_{kqs}$  от переменных  $q$  и  $s$ . Диапазон интересных значений  $q$  для эффекта Мессбауэра ограничен законом сохранения энергии (4.5), а именно значениями, лежащими на так называемой «энергетической оболочке». Эта оболочка представляет собой почти правильную сферу в импульсном пространстве, так как величина разрешенной энергии фотона очень слабо зависит от угла вследствие малости эффектов отдачи. Изменения  $q$  не превышают  $10^{-6}$  абсолютной величины во всей области разрешенных законом сохранения значений. Коэффициенты, входящие в феноменологические гамильтонианы взаимодействия [вроде нашего гамильтониана (4.2)], обычно считают гладкими непрерывными функциями своих переменных, если нет веских физических соображений, заставляющих предполагать противное. Вряд ли следует ожидать поэтому, чтобы значения  $C_{kqs}$  действительно существенно менялись (или колебались) при изменении

величины  $q$  на одну миллионную часть. Поэтому мы пренебрежем зависимостью  $C_{kqs}$  от  $q$  в области импульсов, которая представляет интерес для эффекта Мессбауэра.

Если ядро в начальный момент покоилось и до начала излучения имело сферическую форму, то ни одно из направлений в пространстве физически не было выделено. Поэтому из соображений инвариантности относительно пространственных поворотов сразу заключаем, что должны быть одинаковыми вероятности испускания фотона во всех направлениях и что должны равняться друг другу вероятности испускания фотона обеих поляризацій. Если начальное ядро было сферическим, то требования инвариантности относительно пространственных поворотов и пространственной инверсии легче всего учесть, используя непосредственно законы сохранения углового момента и четности и налагая ограничения на угловой момент и внутреннюю четность (т. е. на «мультипольность») фотона. Если по каким-то причинам разрешенным оказывается излучение только одной определенной мультипольности, то угловое распределение и поляризация испущенных ядром фотонов определяются совершенно однозначно. Если же возможно излучение фотонов более чем одной мультипольности, то угловое распределение и поляризацию испущенных фотонов можно найти только в том случае, если известны «относительные веса» мультиполей, т. е. величины, определяющие структуру ядра, находящегося в заданном состоянии. Это типичная задача, которой занимается «теория угловых корреляций ядерных излучений», и мы здесь ею больше заниматься не будем.

Таким образом, зависимость коэффициентов  $C_{kqs}$  от индексных переменных полностью определяется законами сохранения и соображениями инвариантности. Пренебрегая релятивистскими поправками и эффектами угловых корреляций, возникающими в случае несферических ядер, мы можем в формуле (4.6) для вероятности излучения полностью пренебречь зависимостью коэффициентов  $C_{kqs}$  от их индексов и положить

$$C_{kqs} \approx C. \quad (4.10a)$$

В более общем случае несферически симметричных ядер мы пренебрежем только зависимостью от  $k$ , т. е. положим

$$C_{kqs} \approx C_{qs}. \quad (4.10b)$$

Подчеркнем, что зависимость от  $q$  можно пренебречь только в формуле «золотого правила», но отнюдь не в гамильтониане взаимодействия (4.2), так как этот гамильтониан описывает также и виртуальные процессы, в которых энергия не сохраняется. Конечно, предположение (4.10b) о независимости от  $k$  можно использовать и для гамильтониана взаимодействия, так как независимость  $C_{kqs}$  от  $k$  никак не связана с законом сохранения энергии.

## § 2. Излучение связанным ядром

Рассмотрим теперь ситуацию, когда ядро, испускающее  $\gamma$ -квант, не свободное, а связанное, т. е. движется в некотором внешнем потенциале. Нашу теорию из § 1 настоящей главы для свободного ядра можно при этом немного изменить и обобщить точно так же, как мы обобщали упрощенную теорию из § 3 гл. 2. Эффект связывания ядра внешним потенциалом можно описать, добавив в феноменологический гамильтониан (4.1), (4.2) слагаемое с «внешней» потенциальной энергией, записанное в виде одночастичного оператора в представлении вторичного квантования самого общего вида:

$$V = \sum_{kk'} V_{kk'} a_{k'}^\dagger a_k. \quad (4.11)$$

В теории, развиваемой для ядра, связанного внешним потенциалом, использовать плоские волны в качестве базиса не удобно. Нужно вместо них взять систему одночастичных собственных состояний точечного ядра, движущегося в заданном внешнем потенциале (т. е. нужно перейти от плоских волн к функциям гармонического осциллятора, если мы имеем внешний гармонический осцилляторный потенциал). Обозначим через  $a_{ng}^\dagger$  и  $a_{ne}^\dagger$  операторы рождения соответственно в основном и возбужденном внутреннем состояниях ядра, находящегося одновременно в  $n$ -м возбужденном состоянии внешнего потенциала.

Полный гамильтониан нашей системы теперь можно записать в следующем виде:

$$H = \sum_{ks} (\hbar kc) b_{ks}^\dagger b_{ks} + \sum_n E_{ne} a_{ne}^\dagger a_{ne} + \sum_n E_{ng} a_{ng}^\dagger a_{ng} + H_{\text{int}}, \quad (4.12)$$

где  $E_{ne}$  и  $E_{ng}$  — энергии, которыми обладает ядро, находящееся в  $n$ -м возбужденном состоянии внешнего потенциала и одновременно соответственно в своем возбужденном или в своем основном внутреннем состоянии; в (4.12)  $H_{\text{int}}$  — это гамильтониан взаимодействия (4.2). Нам необходимо теперь преобразовать оператор взаимодействия  $H_{\text{int}}$  к новому базису, т. е. к новым операторам вторичного квантования. Прежде всего, однако, преобразуем к новому базису следующее произведение операторов рождения и уничтожения:

$$a_{k-q, g}^\dagger a_{ke} = \sum_{n'n''} \langle n''g | k - q, g \rangle \langle ke | n'e \rangle a_{n''g}^\dagger a_{n'e}. \quad (4.13)$$

Здесь коэффициенты  $\langle n''g | k - q, g \rangle$  и  $\langle ke | n'e \rangle$  — коэффициенты преобразования, возникающие при разложении одночастичных плоских волн по одночастичным собственным состояниям внешнего потенциала (4.11). Это коэффициенты преобразования функций, описывающих движение ядра как целого во внешнем потен-



циале. Они не зависят от состояния внутреннего возбуждения ядра, поэтому у этих коэффициентов мы опустим индексы  $g$  и  $e$ . Разумеется, тем самым мы пренебрегаем и различием масс ядра до и после излучения им  $\gamma$ -кванта, приводящим к температурному сдвигу. Если угодно, его можно будет учесть после (по теории возмущений) точно так же, как это было сделано в упрощенной теории, изложенной в § 8 гл. 2. Вместо формулы (2.20) мы имеем формулу

$$\begin{aligned} \langle n'' | k - q \rangle &= \int \psi_{n''}^*(x) e^{i(k-q) \cdot x} dx = \\ &= \int \psi_{n''}^*(x) e^{-iq \cdot x} e^{ik \cdot x} dx = \langle n'' | e^{-iq \cdot x} | k \rangle, \end{aligned} \quad (4.14)$$

где  $x$  — координата центра массы ядра, а  $\psi_{n''}(x)$  — шредингеровская волновая функция для собственного состояния  $|n''\rangle$ . При действии оператора  $e^{-iq \cdot x}$  на плоскую волну с волновым вектором  $k$  она переходит в другую плоскую волну с волновым вектором  $k - q$ . Используя (4.14) и условие полноты, легко просуммировать (4.13) по индексу  $k$ :

$$\begin{aligned} \sum_k a_{k-q, g}^\dagger a_{ke} &= \sum_{n'' n'''} \langle n'' | e^{-iq \cdot x} | k \rangle \langle k | n' \rangle a_{n'' g}^\dagger a_{n' e} = \\ &= \sum_{n'' n'''} \langle n'' | e^{-iq \cdot x} | n' \rangle a_{n'' g}^\dagger a_{n' e}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Подставляя (4.15) в (4.2), можно получить простое выражение для оператора взаимодействия в новом базисе, имеющее следующий вид:

$$H_{\text{int}} = \sum_{n'' n'''} C_{qs} \langle n'' | e^{-iq \cdot x} | n' \rangle a_{n'' g}^\dagger a_{n' e} b_{qs}^\dagger + \text{эрмит. сопр.} \quad (4.16)$$

Здесь мы использовали предположение (4.10б).

С помощью формулы «золотого правила» временной теории возмущений легко найти формулу для вероятности перехода в единицу времени ядра из начального состояния  $|n'\rangle$  в конечное состояние  $|n''\rangle$  при излучении им фотона:

$$W_{n' \rightarrow n''} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{qs}|^2 |\langle n'' | e^{-iq \cdot x} | n' \rangle|^2 \rho_f, \quad (4.17a)$$

или, с учетом формулы (4.6) для свободного ядра, формулу

$$W_{n' \rightarrow n''} = W_{i \rightarrow f}^F |\langle n'' | e^{-iq \cdot x} | n' \rangle|^2. \quad (4.17b)$$

Чтобы сравнить этот результат с результатом упрощенной теории из § 3 гл. 2, вычислим вероятность  $P_{n' \rightarrow n''}$  того, что ядро, находившееся первоначально в состоянии  $|n'\rangle$ , окажется в результате

излучения  $\gamma$ -кванта в состоянии  $|n''\rangle$ . Для этого нужно отнормировать вероятность (4.17). Так как разности энергий различных конечных состояний  $n''$  очень малы по сравнению с энергией  $\gamma$ -кванта, мы здесь пренебрежем зависимостью плотности конечных состояний  $\rho_f$  от небольшого разброса энергии  $\gamma$ -кванта, т. е. будем считать  $\rho_f$  не зависящим от  $|n''\rangle$ . Тогда (4.17) легко просуммировать по всем конечным состояниям  $n''$ . Таким образом, полная вероятность перехода из начального состояния  $|n'\rangle$  в единицу времени равна

$$\sum_{n''} W_{n' \rightarrow n''} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{qs}|^2 \rho_f. \quad (4.18)$$

Следовательно,

$$P_{n' \rightarrow n''} = \frac{W_{n' \rightarrow n''}}{\sum_{n''} W_{n' \rightarrow n''}} = |\langle n'' | e^{-iq \cdot x} | n' \rangle|^2. \quad (4.19)$$

Эта формула в точности совпадает с формулой (2.24), полученной в упрощенной теории, в которой процесс излучения  $\gamma$ -кванта ядром описывался очень утрированно. Так как все результаты в отношении структуры спектра энергии излученных  $\gamma$ -квантов, приведенные в § 3—8 гл. 2, были получены на основании формулы, в точности совпадающей с формулой (4.19), и на основании закона сохранения энергии (2.25), то и из нашей теперешней теории, включающей полное описание процесса излучения, следуют точь-в-точь те же результаты. Единственное различие состоит в том, что закон сохранения энергии в той форме, в которой он использовался в упрощенной теории, выполняется не абсолютно строго, так как теперь учитывается конечность ширины спектральной линии излучения  $\gamma$ -кванта. При написании гамильтониана (4.12) закон сохранения энергии для каждого элементарного акта взаимодействия не использовался, и поэтому любое решение уравнения Шредингера, составленного для этого гамильтониана, автоматически включает все эффекты, связанные с конечностью ширины линии.

Обобщение упрощенной теории эффекта Мессбауэра, изложенной в гл. 3, на случай излучающего ядра, заключенного в твердом теле, или ядра, находящегося в состоянии теплового равновесия, по существу не зависит от деталей протекания процесса излучения ядром  $\gamma$ -кванта и поэтому может быть непосредственно включено в данное рассмотрение. Поскольку в гамильтониан взаимодействия (4.16) вошли состояния  $|n'\rangle$  и  $|n''\rangle$ , т. е. он записан фактически в базисе любых одночастичных состояний, то его можно использовать для любого другого базиса, например для базиса нормальных колебаний кристаллической решетки. Получаемые

при этом результаты будут в точности совпадать с приведенными в гл. 3.

Соотношение (4.176) между вероятностями перехода в случае свободного ядра и в случае связанного ядра иллюстрирует очень важное и общее свойство любого процесса передачи импульса какому-либо элементу связанной системы. Вероятность перехода для связанного ядра (4.176) равна произведению вероятности перехода для свободного ядра и множителя  $|\langle n' | e^{-iq \cdot x} | n \rangle|^2$ , который зависит лишь от свойств связанных состояний  $|n\rangle$  и  $|n'\rangle$  и величины переданного импульса  $\hbar q$ , но не зависит от деталей протекания процесса излучения. Этот множитель называется «формфактором» или «структурным фактором»; он появляется в теории процессов, встречающихся в самых различных областях физики. В остальных параграфах этой главы мы покажем, как можно использовать только что развитую теорию в трех совершенно разных задачах: 1) рассеяния фотонов связанным атомом, 2) ядерного бета-распада и 3) рассеяния высокоэнергетических электронов сложным ядром. Для всех этих задач используется «золотое правило», которое принимает вид формулы, аналогичной (4.176).

### § 3. Рассеяние фотонов связанным ядром

Гамильтониан взаимодействия (4.16) можно использовать для описания процессов рассеяния, а не только процессов излучения фотонов ядром, связанным внешним потенциалом или полем кристалла. Рассмотрим такое начальное состояние невзаимодействующей системы, в котором имеется один фотон, описываемый плоской волной с волновым вектором  $q_i$ , и одно ядро, находящееся в своем основном состоянии и колеблющееся в поле кристаллической решетки, состояние которой характеризуется квантовыми числами  $n_i$ :

$$|i\rangle = |q_i, g, n_i\rangle. \quad (4.20)$$

Процесс рассеяния — это квантовый переход из состояния (4.20) в конечное состояние (являющееся тоже состоянием невзаимодействующей системы), в котором фотон описывается другой плоской волной с волновым вектором  $q_f$ , ядро остается в основном состоянии, а кристалл находится в состоянии  $|n_f\rangle$ , которое может совпадать или не совпадать с начальным:

$$|f\rangle = |q_f, g, n_f\rangle. \quad (4.21)$$

Такой квантовый переход описывается лишь во втором порядке временной теории возмущений, так как взаимодействие должно обязательно подействовать дважды: один раз, чтобы уничтожить падающий фотон, а другой раз, чтобы родить рассеянный фотон.

При этом в промежуточном состоянии ядро будет находиться в некотором возбужденном состоянии  $|e\rangle$ . При действии гамилтонианом взаимодействия (4.16) на начальное состояние получаются два типа промежуточных состояний, которые могут вносить вклад в рассматриваемый квантовый переход: состояния, не содержащие фотонов, и состояния, содержащие два фотона, — и падающий и рассеянный одновременно. (Рассеянный фотон может быть испущен системой как до, так и после поглощения падающего фотона.) В промежуточном состоянии состояние кристаллической решетки  $|n'\rangle$  и возбужденное состояние ядра  $|e\rangle$  могут быть, конечно, совершенно произвольными. Поэтому мы здесь немного обобщим гамилтониан взаимодействия (4.16), заменив в нем коэффициенты  $C_{qs}$  на коэффициенты  $C_{qse}$  [зависящие еще и от конкретного возбужденного промежуточного состояния  $|e\rangle$  ядра] и введя в (4.16) дополнительное суммирование по всем таким состояниям. Так как во все наши вычисления входят только два значения  $q$ , а именно  $q_i$  и  $q_f$ , то мы упростим обозначения и заменим  $C_{q_i s_i e}$  и  $C_{q_f s_f e}$  соответственно на  $C_{ie}$  и  $C_{fe}$ . Вероятность рассматриваемого квантового перехода дается тогда следующей формулой «золотого правила», выписанной для процессов второго порядка:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_e \sum_{n'} \left\{ C_{fe} C_{ie}^* \frac{\langle n_f | e^{-iq_f \cdot x} | n' \rangle \langle n' | e^{iq_i \cdot x} | n_i \rangle}{E_{n_f g} + \hbar q_i c - E_{n' e}} + C_{fe}^* C_{ie} \frac{\langle n_f | e^{iq_i \cdot x} | n' \rangle \langle n' | e^{-iq_f \cdot x} | n_i \rangle}{E_{n_f g} - \hbar q_f c - E_{n' e}} \right\} \right|^2 \rho_f. \quad (4.22)$$

Это совершенно общая формула, и ее применимость не ограничивается только случаем мессбауэровского рассеяния. Она, однако, описывает процессы только *нерезонансного* рассеяния, так как при резонансе знаменатель ее первого слагаемого обращается в нуль.

Для нерезонансного рассеяния формулу (4.22) можно еще больше упростить, так как энергетические знаменатели в (4.22) имеют порядок величины энергий ядерных переходов, т. е. очень велики по сравнению с характерными энергиями решетки. Следовательно, зависимостью энергетических знаменателей от конкретных промежуточных состояний  $|n'\rangle$  кристаллической решетки можно пренебречь, после чего сумму по этим состояниям легко вычислить, используя условие полноты. Так мы получаем формулу

$$W_{i \rightarrow f} = W^F |\langle n_f | e^{i(q_i - q_f) \cdot x} | n_i \rangle|^2, \quad (4.23)$$

в которой

$$W^F = \frac{2\pi}{h} \left| \sum_e \left\{ \frac{C_{fe} C_{ie}^*}{E_g + \hbar q_{ic} - E_e} + \frac{C_{je}^* C_{ie}}{E_g - E_e - \hbar q_{jc}} \right\} \right|^2 \rho_f \quad (4.24)$$

— вероятность квантового перехода при рассеянии на свободном ядре. Полученная формула полностью аналогична формуле (4.17), выведенной выше для процесса мессбауэровского излучения связанным ядром. Вероятность перехода снова равна произведению вероятности соответствующего перехода для свободного ядра и множителя, зависящего только от величины переданного импульса и от начального и конечного состояний кристаллической решетки. Этот множитель есть не что иное, как *фактор Дебая — Валлера*, который исторически впервые был введен именно в теории процессов рассеяния, а не процессов излучения (при рассмотрении рассеяния рентгеновских лучей атомами кристалла).

Формулы (4.23) и (4.24) можно также применить к описанию *нерезонансного* рассеяния рентгеновских лучей не на ядрах, а на *атомах*, связанных в кристаллической решетке. Индексы  $g$  и  $e$  будут обозначать тогда основное и возбужденное состояния атома, а не ядра. Хотя энергии возбуждения атомных уровней существенно меньше, чем ядерных уровней, они все же на несколько порядков превышают характерные энергии колебаний решетки, и поэтому использованное при переходе от (4.22) к (4.23) приближение по-прежнему остается справедливым и в рассматриваемом случае. Чтобы формулы (4.23) и (4.24) можно было действительно применить к описанию рассеяния рентгеновских лучей на атомах кристалла, в них нужно внести еще одно небольшое изменение. В связи с тем что рентгеновский фотон может рассеяться на любом из атомов кристалла, матричный элемент соответствующего квантового перехода должен получаться суммированием матричных элементов вида (4.23) по всем атомам. Обозначая координату  $k$ -го атома через  $x_k$ , находим

$$W_{i \rightarrow f} = W^F \left| \sum (n_f | e^{i(q_i - q_f) \cdot x_k} | n_i) \right|^2 \quad (4.25)$$

Сумма в (4.25) составлена из очевидным образом когерентных слагаемых; они интерферируют и усиливают друг друга в направлении брэгговских углов, если рассеяние *упругое*, т. е. когда  $|n_f\rangle = |n_i\rangle$  и когда энергия не передается кристаллу. При процессах неупругого рассеяния, когда  $|n_f\rangle \neq |n_i\rangle$ , спектр энергий рассеянных рентгеновских лучей практически непрерывен из-за того, что неконтролируемая часть энергии может передаваться от фотона решетке. Вследствие того что соответствующий спектр длин волн тоже непрерывен, такое рассеяние будет *некогерентным*.

Отметим, что формулу (4.25) можно интерпретировать двояко, и это является хорошей иллюстрацией корпускулярно-волнового дуализма. Пока что мы рассматривали фотон как корпускулу, т. е. частицу, которая может передавать энергию и импульс кристаллической решетке. Фазовые множители в формуле (4.25) появились у нас от учета передаваемого импульса; некогерентное рассеяние получилось как следствие неконтролируемой передачи энергии при неупругих процессах рассеяния. Обычно, однако, при интерпретации брэгговского рассеяния, т. е. рассеяния рентгеновских лучей решеткой, исходят, наоборот, не из корпускулярных, а из волновых свойств фотона. Тогда фазовые множители в формуле (4.25) объясняют как возникшие из-за имеющейся разности хода волн, рассеянных разными атомами. Некогерентное рассеяние волны объясняется наличием флуктуаций в положениях рассеивающих атомов; эти флуктуации приводят к хаотизации фаз вторичных (рассеянных) волн.

Для описания *резонансного* рассеяния, например рассеяния в эффекте Мессбауэра, нужно немного изменить нашу теорию и включить в нее так называемые *эффекты радиационного затухания*. Учет этих эффектов сводится к добавлению небольших мнимых слагаемых к энергетическим знаменателям, что сразу устраняет бесконечность в первом слагаемом в формуле (4.24). Мы здесь не будем проводить подробных вычислений, так как в настоящий момент нас интересует только вопрос о различии резонансного рассеяния на свободном ядре и на ядре, связанном в кристалле. При резонансном рассеянии можно считать, что практически весь вклад в него вносит то слагаемое в нашей основной формуле (4.22), энергетический знаменатель для которого обращается в нуль. Таким будет слагаемое, которое соответствует определенному возбужденному состоянию ядра  $|e\rangle$  и такому определенному промежуточному состоянию решетки, для которого  $|n'\rangle = |n_i\rangle$ . (Хотя в принципе возможно резонансное рассеяние, для которого промежуточное состояние решетки  $|n'\rangle$  не совпадает с начальным, матричный элемент для каждого *отдельного* такого состояния, не совпадающего с начальным, столь мал, что им можно пренебречь.) Так как  $|n'\rangle = |n_i\rangle$ , то ни сам энергетический знаменатель, ни дополнительное мнимое слагаемое в нем, появляющееся вследствие наличия эффектов затухания, не будут зависеть от переменных, характеризующих решетку. Поэтому и в разбираемом сейчас случае резонансного рассеяния результат можно вновь представить в виде произведения *двух* множителей: вероятности квантового перехода для свободного ядра и множителя, описывающего эффект связывания ядра в решетке. Таким образом, мы получаем формулу

$$W_{i \rightarrow f, n_f} = W^F |\langle n_f | e^{-iq_f \cdot x} | n_i \rangle \langle n_i | e^{iq_i \cdot x} | n_i \rangle|^2. \quad (4.26)$$

В эту формулу, как видим, входят теперь два множителя, аналогичные фактору Дебая — Валлера, которые зависят от величин передаваемых импульсов: один — от начального импульса  $q_i$ , а другой — от конечного импульса  $q_f$ . Напомним, что в формуле для нерезонансного рассеяния рентгеновских лучей атомами кристаллической решетки фигурирует только один множитель указанного типа, который зависит только от величины передаваемого импульса. Это различие формул объясняется тем, что при резонансном рассеянии мы предполагаем, что можно учитывать только одно специальное промежуточное состояние решетки и что весь импульс падающего фотона поглощается всей решеткой в целом. При нерезонансном рассеянии нужно учитывать все промежуточные состояния решетки, причем в этих промежуточных состояниях передача импульса кристаллической решетке не обязательно упругая.

Если положить  $|n_f\rangle = |n_i\rangle$  в формуле (4.26), то легко можно найти вероятность так называемого «двойного эффекта Мессбауэра», при котором совсем не тратится энергия на отдачу как при поглощении фотона, так и при его вторичном испускании. Испускаемый фотон при этом обладает в точности той же энергией, что и налетающий. Возникающее при таком упругом рассеянии рентгеновское или  $\gamma$ -излучение можно использовать затем в экспериментах по брэгговскому рассеянию или в качестве исходного излучения для последующих мессбауэровских экспериментов.

В большинстве мессбауэровских экспериментов энергия рассеянного фотона непосредственно не измеряется и фактически находится лишь вероятность перехода, просуммированная по всем конечным состояниям. Суммирование по состояниям  $|n_f\rangle$  в формуле (4.26) очень легко провести, если использовать условие полноты, в результате чего получим

$$\sum_f W_{i \rightarrow f} = W^F |\langle n_i | e^{i q_i \cdot x_i} | n_i \rangle|^2. \quad (4.27)$$

В формулу (4.27) входит самый обычный для эффекта Мессбауэра множитель, зависящий от передаваемого импульса; этот множитель зависит от полного импульса  $\gamma$ -кванта. В данном случае он зависит от передаваемого импульса и относится только к процессу поглощения, так как процессы излучения, просуммированные по всем состояниям решетки, включают как упругие, так и неупругие компоненты.

#### § 4. Ядерный $\beta$ -распад

Применим теперь развиваемую в этой главе теорию к описанию ядерного  $\beta$ -распада. Рассмотрим прежде всего распад свободного нейтрона на протон, электрон и нейтрино. Гамильтониан взаимо-

действия, описывающий этот процесс, имеет следующий вид:

$$H_{\text{int}} = \sum_{kqs} C_{kqs} a_p^\dagger, k-q, a_e^\dagger, q-s a_\nu a_{nk} + \text{эрмит. сопр.} \quad (4.28)$$

В него входят операторы рождения и уничтожения для протонов, нейтронов, электронов и нейтрино ( $p, n, e$  и  $\nu$ ), рождающие и уничтожающие эти частицы в состояниях, описываемых плоскими волнами. Отметим, что в (4.28) мы пренебрегли спиновыми степенями свободы всех указанных частиц. Записывая гамильтониан взаимодействия в виде (4.28), мы учли закон сохранения импульса в каждом элементарном акте взаимодействия; это нам позволило ввести коэффициенты взаимодействия  $C_{kqs}$ , характеризующие интенсивность взаимодействия и зависящие от *трех* следующих переменных: начального импульса нейтрона  $\hbar k$ , переданного импульса  $q$  и импульса нейтрино  $s$ . Вид зависимости коэффициентов  $C_{kqs}$  от начального импульса  $k$  вновь определяется требованиями лоренцевой инвариантности, так как эта зависимость однозначно определяет соотношение между вероятностями процессов  $\beta$ -распада, увиденных разными наблюдателями, движущимися с различными скоростями по отношению к распадающемуся нейтрону. При нерелятивистских скоростях нейтрона лоренцева инвариантность сводится к галилеевой инвариантности, и мы вновь приходим к требованию независимости  $C_{kqs}$  от  $k$  с точностью до величин порядка  $v/c$ . Когда  $\beta$ -распад описывается в первом порядке теории возмущений, вероятность перехода определяется по формуле «золотого правила» и, согласно этой формуле, пропорциональна квадрату соответствующего матричного элемента оператора взаимодействия (4.28), взятого между начальным и конечным состояниями невозмущенного гамильтониана.

Рассмотрим теперь  $\beta$ -распад не свободного нейтрона, а нейтрона, связанного в сложном ядре. Гамильтониан взаимодействия (4.28) при этом никак не изменится, но нужно будет изменить невозмущенный гамильтониан, включив в него эффекты влияния ядерных сил связи на распадающийся нейтрон. Мы снова для простоты пренебрежем спинами, а также кулоновским взаимодействием испущенного электрона с остающимся положительно заряженным ядром и релятивистскими поправками, имеющими порядок  $v/c$ , где  $v$  — скорость нейтрона в ядре. После указанного изменения невозмущенный гамильтониан станет гамильтонианом, который будет описывать все детали ядерной структуры. Его собственные функции характеризуют состояния системы, состоящей из сложного ядра и свободных, т. е. невзаимодействующих с ядром и между собой, электрона и нейтрино.

Рассмотрим теперь квантовый переход из *начального* состояния  $|n_i\rangle$  этой системы, в котором есть только сложное ядро, преобладающее в некотором своем состоянии  $|n_i\rangle$ , и нет электрона



п нейтринно, в некоторое *конечное* состояние  $|n_f, \mathbf{q}\mathbf{s}\rangle$ , в котором есть сложное ядро, находящееся в состоянии  $|n_i\rangle$ , нейтринно с импульсом  $\hbar\mathbf{s}$  и электрон с импульсом  $\hbar(\mathbf{q} - \mathbf{s})$ . Вероятность такого перехода в единицу времени можно найти, пользуясь формулой «золотого правила»; эта вероятность равна

$$W_{n_i \rightarrow n_f, \mathbf{q}, \mathbf{s}} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{q\mathbf{s}}|^2 \left| \langle n_f | \sum_k a_{p, k-q}^\dagger a_{nk} | n_i \rangle \right|^2 \rho_f. \quad (4.29)$$

Мы вновь видим, что вероятность перехода представляет произведение *двух* множителей. Первый множитель  $|C_{q\mathbf{s}}|^2$  зависит только от вида взаимодействия, обуславливающего  $\beta$ -распад, и не зависит от рассматриваемых начального и конечного состояний сложного ядра. Второй множитель, наоборот, зависит только от состояний сложного ядра и от величины передаваемого импульса  $\mathbf{q}$ . Сравним формулу (4.29) с соответствующей формулой (4.17а) для эффекта Мессбауэра. В отличие от последней коэффициент взаимодействия  $C_{q\mathbf{s}}$  в формуле (4.29) зависит не от одного, а от двух импульсов  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{s}$ , так как при  $\beta$ -распаде испускаются две частицы — электрон и нейтринно, а не один фотон, как в эффекте Мессбауэра. Импульсы испущенных частиц нельзя однозначно определить из законов сохранения энергии и импульса, так как энергия и импульс могут различными способами распределяться между электроном и нейтринно. Однако разрешенные значения  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{s}$ , конечно, ограничены условием сохранения энергии, которое пока что в формуле (4.29) мы никак не учли.

Матричный элемент перехода сложного ядра из начального состояния в конечное, появляющийся в формуле (4.29), берется от оператора, характеризующего передачу импульса; он совершенно такой же, как в эффекте Мессбауэра. Но если в эффекте Мессбауэра имеется только одно определенное ядро, которое совершает квантовый переход из возбужденного состояния в основное, то в случае  $\beta$ -распада в сложном ядре мы имеем много нейтронов, любой из которых может превратиться в протон. Это обстоятельство проявится, если мы преобразуем формулу (4.29) таким образом, чтобы в нее входил оператор перехода, записанный в шредингеровском представлении, т. е. представим ее в виде

$$W_{n_i \rightarrow n_f, \mathbf{q}, \mathbf{s}} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{q\mathbf{s}}|^2 \left| \langle n_f | \sum_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \tau_{+j} | n_i \rangle \right|^2 \rho_f, \quad (4.30)$$

где  $\tau_{+j}$  — оператор, действующий в изоспиновом пространстве и переводящий  $j$ -ю частицу из «нейтронного» состояния в «протонное».

При ядерном  $\beta$ -распаде энергии излученных электрона и нейтринно имеют тот же порядок величины, что и разность энергий соответствующих уровней сложного ядра. Поэтому в отличие от

эффекта Мессбауэра теперь плотность конечных состояний  $\rho_f$  существенно зависит от  $n_f$ . Следовательно, для относительных вероятностей различных переходов нельзя получить простые формулы, аналогичные (4.19). Однако в теории  $\beta$ -распада можно сделать другие упрощающие предположения. Электроны и нейтрино, испущенные при  $\beta$ -распаде, обладают энергиями порядка 1 МэВ. Соответствующие длины волн этих частиц значительно превышают радиус ядра. Поэтому величина  $q \cdot x_j$  очень мала по сравнению с единицей (конечно, если только  $x_j$  не выходит далеко за пределы ядра). Вероятность обнаружить нуклон за пределами сферы, радиус которой равен среднему радиусу ядра, очень быстро убывает с расстоянием от центра сферы и практически равна нулю за пределами поверхности ядра. Следовательно, экспоненциальный множитель в формуле (4.30) можно разложить по степеням аргумента. Вероятность перехода с большой степенью точности определяется, таким образом, первым членом разложения, матричный элемент для которого между двумя рассматриваемыми ядерными состояниями не обращается в нуль.

При этом наиболее сильными будут те переходы, для которых не обращается в нуль вклад от первого члена разложения. Они называются «разрешенными» переходами. Формулу для вероятности разрешенных переходов можно получить заменой экспоненты в формуле (4.30) на единицу. Тогда имеем для разрешенных переходов

$$W_{n_i \rightarrow n_f, q, s} = \frac{2\pi}{\hbar} |C_{qs}|^2 |\langle n_f | T_+ | n_i \rangle|^2 \rho_f, \quad (4.31)$$

где

$$T_+ = \sum_j \tau_{+j}; \quad (4.32)$$

это «плюсовая» компонента полного изоспина ядра. Поскольку  $T_+$  коммутирует как с оператором полного изоспина, так и с оператором полного момента количества движения, то при разрешенных переходах, описываемых формулой (4.31), изоспин и полный момент количества движения конечного  $|n_f\rangle$  и начального  $|n_i\rangle$  состояний ядра должны совпадать. Эти переходы называются «переходами Ферми». Ограничения, налагаемые на квантовые числа изоспина и момента количества движения, обычно записывают в форме следующих «правил отбора»:

$$\Delta J = 0, \quad \Delta T = 0 \quad \text{для разрешенных переходов Ферми,} \quad (4.33)$$

где  $J$  — квантовое число полного момента количества движения, а  $T$  — квантовое число полного изоспина ядра.

Если в нашу теорию ввести спин (но по-прежнему использовать нерелятивистское приближение), то в формуле (4.29) появ-

вятся два типа матричных элементов: в одних спин образующегося протона будет пераллелен спину распадающегося нейтрона; в других спин будет «переворачиваться», т. е. в этом случае спин протона будет антипараллелен спину нейтрона. Матричный элемент, имеющийся в формулах (4.29) и (4.30), относится к случаю параллельных спинов. Матричный элемент в случае антипараллельных спинов получается путем введения в оператор, от которого он берется, добавочного множителя, зависящего от спина и, как можно показать, оказавшегося просто спиновым оператором Паули. Переходы с переворачиванием спина называются «переходами Гамова — Теллера». Матричный элемент для таких переходов между начальным и конечным состояниями ядра имеет следующий вид:

$$\langle n_f | GT | n_i \rangle = \langle n_f | \sum_j e^{-iq \cdot x_j} \sigma_j \tau_{+j} | n_i \rangle, \quad (4.34)$$

где  $\sigma_j$  — спиновый оператор Паули.

Множитель  $e^{iq \cdot x_j}$ , как и для переходов Ферми, можно разложить по степеням  $q$ . Первый член разложения будет соответствовать теперь уже «разрешенным» переходам Гамова — Теллера. Оператор  $\sum_j \sigma_j \tau_{+j}$ , конечно, нельзя теперь свести к изоспиновому оператору всего ядра, но он преобразуется как вектор и в обычном пространстве момента количества движения, и в изоспиновом пространстве. Используя это обстоятельство, легко вывести следующие «правила отбора» для «разрешенных» переходов Гамова — Теллера:

$$\Delta J = 0 \text{ или } \Delta J = 1, \quad \Delta T = 0 \text{ или } \Delta T = 1 \text{ для «разрешенных»} \\ \text{переходов Гамова — Теллера, причем переходы } J = 0 \rightarrow J = 0 \text{ запрещены.} \quad (4.35)$$

В теории Ферми ядерного  $\beta$ -распада коэффициенты взаимодействия  $C_{qs}$  предполагаются не зависящими от передаваемого импульса  $q$ . Эта независимость получается как следствие предполагаемого «локального» характера взаимодействия (4.28), т. е. считается, что протон, электрон и нейтрино рождаются в одной и той же точке  $x$  обычного (конфигурационного) пространства, в которой распадается порождающий их нейтрон. Формулы для оператора взаимодействия в конфигурационном и импульсном пространствах получают друг из друга простым преобразованием Фурье; используя последнее, очень легко показать, что требованию локальности взаимодействия в конфигурационном пространстве эквивалентно требованию независимости коэффициентов  $C_{kqs}$  от импульсов  $q$  и  $s$ .

Так как из соответствующих матричных элементов, берущихся между начальным и конечным состояниями ядра, для «разрешенных» ядерных переходов полностью выпадает зависимость от передаваемого импульса  $q$ , то единственным зависящим от импульса множителем в формуле (4.31) остается плотность конечных состояний  $\rho_f$ . Следовательно, вид спектров энергий электронов и нейтрино, испущенных при  $\beta$ -распаде, определяется исключительно статистическим множителем  $\rho_f$ . Масса ядра, конечно, очень велика, поэтому при использовании закона сохранения энергии кинетической энергией отдачи ядра можно, несомненно, пренебречь. В таком случае плотность состояний  $\rho_f$  просто равна плотности состояний системы, составленной из невзаимодействующих электрона и нейтрино, причем тех состояний, полная энергия которых вследствие учета ограничения, вытекающего из закона сохранения энергии, принимает только некоторое, вполне определенное значение. Форма спектра энергий испущенных при  $\beta$ -распаде электронов, таким образом, полностью определяется только величиной полной энергии системы, образованной электроном и нейтрино; следовательно, она одинакова для «разрешенных» переходов, соответствующих одинаковым энергиям. Этот вывод нашей теории хорошо подтверждается экспериментами по  $\beta$ -распаду.

Гамильтониан взаимодействия (4.28) легко обобщить, чтобы он включал в себя все типы «четырехфермионных слабых взаимодействий», т. е. таких взаимодействий, которые описывают распад протона на нейтрон, позитрон и нейтрино, захват электрона протоном с образованием нейтрона и нейтрино и аналогичные реакции с участием  $\mu$ -мезона вместо электрона. Получаемые при этом формулы для позитронного  $\beta$ -распада и электронного захвата аналогичны приведенным выше формулам для электронного  $\beta$ -распада и приводят к тем же самым правилам отбора (4.33) и (4.35).

Для захвата  $\mu$ -мезона сложным ядром получается формула, аналогичная формуле (4.30), но с включением в нее поправок на спин и релятивистские эффекты. Испускаемое в таком процессе нейтрино обладает очень большим импульсом, так как оно уносит основную часть энергии покоя мюона, которая порядка 100 МэВ. Разлагать экспоненту в матричном элементе в (4.30) теперь уже нельзя, так как показатель экспоненты велик. Матричные элементы, разделяемые обычно на «разрешенные» и «запрещенные», в данном случае одинаковы по порядку величины. Вид матричного элемента для рассматриваемого процесса очень напоминает вид матричного элемента для эффекта Мессбауэра. Более того, если пренебречь спинами и начальное и конечное состояния ядра описывать с помощью осцилляторной модели оболочек, то матричный элемент перехода вообще будет в точности совпадать с матричным элементом для эффекта Мессбауэра. Рассматриваемый сейчас

квантовый переход связан с превращением протона, находящегося на определенной орбите в поле гармонического осциллятора, в нейтрон, причем этот нейтрон либо остается на той же орбите гармонического осциллятора, либо перескакивает на другую его орбиту. Если он остается на той же самой орбите, то матричный элемент, о котором идет речь, просто равен фактору Дебая — Валлера (2.28).

В эффекте Мессбауэра вся зависимость от сил, связывающих излучающее  $\gamma$ -квант ядро в решетке, входит в окончательную формулу только в виде матричного элемента; последний берется от экспоненциального оператора  $e^{iq \cdot x}$  между состояниями ядра в решетке, т. е. в виде фурье-образа функции плотности вероятности перехода, описывающей данный переход. Эту зависимость можно также охарактеризовать с помощью пространственно-временной корреляционной функции, соответствующей данному движению ядра в решетке. Легко видеть, что эксперименты с эффектом Мессбауэра, если их использовать как метод исследования динамики кристаллической решетки, могут дать информацию только в виде набора значений функции плотности вероятности для различных переходов или в виде соответствующей пространственно-временной корреляционной функции. В экспериментах по  $\mu$ -захвату, в которых любой протон в ядре может превратиться в нейтрон, можно в принципе, помимо значений пространственно-временной корреляционной функции для нейтрона, получить дополнительную информацию о структуре ядра. Чтобы показать это, запишем квадрат матричного элемента перехода в следующем виде:

$$\begin{aligned} |M_{n_i, \mu \rightarrow n_j, \nu}|^2 &= |\langle n_j | \sum_j e^{-iq \cdot x_j} \tau_{-j} | n_i \rangle|^2 = \\ &= \langle n_i | \sum_k e^{iq \cdot x_k} \tau_{+k} | n_j \rangle \langle n_j | \sum_j e^{-iq \cdot x_j} \tau_{-j} | n_i \rangle \end{aligned} \quad (4.36)$$

и выведем соответствующее «правило сумм», суммируя (4.36) по всем возможным конечным состояниям ядра  $n_j$  и используя условие полноты; тогда получим

$$\sum_{n_j} |M_{n_i, \mu \rightarrow n_j, \nu}|^2 = \sum_{j, k} \langle n_i | e^{-iq \cdot (x_j - x_k)} \tau_{+k} \tau_{-j} | n_i \rangle. \quad (4.37)$$

Эта сумма полностью аналогична сумме (2.34), которую мы рассматривали в теории эффекта Мессбауэра. Сумма (2.34) должна была равняться единице, так как мы имели дело только с одним ядром в кристалле, которое совершает переход, т. е. мы должны были считать, что  $j = k$ . Наоборот, сумма (4.37) равна среднему значению определенного оператора, и, зная это среднее значение, мы можем почерпнуть ценные сведения о структуре основного состояния ядра. Если бы в формуле (4.37) не было изоспиновых

операторов, то она давала бы просто фурье-образ «парной корреляционной функции», которая по определению есть функция распределения вероятностей того, что два нуклона в ядре находятся на заданном расстоянии друг от друга. Изоспиновые операторы в (4.37) описывают сопутствующие «зарядовые» превращения, т. е. превращения протонов в нейтроны и нейтронов в протоны. При других процессах, например при рассеянии электронов с высокими энергиями на ядрах, в которых импульс электрона передается нуклону без зарядового превращения последнего, соответствующие формулы вроде (4.37) содержат непосредственно фурье-образ парной корреляционной функции. Именно поэтому эксперименты с такими процессами и были проведены в свое время с целью экспериментального измерения парной корреляционной функции для нуклонов сложного ядра.

### § 5. Рассеяние электронов на сложном ядре

Посмотрим теперь, как происходит рассеяние электронов на сложном ядре. Это рассеяние обусловлено кулоновским взаимодействием электронов с протонами ядра и описывается двухчастичным гамильтонианом взаимодействия, имеющим очень простой вид, если записать его через операторы вторичного квантования:

$$H_C = \sum_{k', k'' q} V_{k' k'' q} a_{k'+q}^\dagger a_{k''-q}^\dagger c_{k''} c_{k'}. \quad (4.38)$$

Операторы  $a_k^\dagger$  и  $c_k^\dagger$  — операторы рождения протона и электрона. Коэффициенты взаимодействия  $V_{k' k'' q}$  — просто фурье-образы кулоновского потенциала в обычном, т. е. в конфигурационном, пространстве, так что

$$V_{k' k'' q} = \int \frac{dr_p}{\Omega} \int \frac{dr_e}{\Omega} e^{-i(k'+q) \cdot r_p} e^{-i(k''-q) \cdot r_e} \times \\ \times V(|r_e - r_p|) e^{ik'' \cdot r_e} e^{ik' \cdot r_p}, \quad (4.39)$$

где  $\Omega$  — объем ящика, на который нормируются волновые функции. Множители, зависящие от  $k'$  и  $k''$  в интеграле (4.39), взаимно сокращаются, и, таким образом, подынтегральное выражение оказывается зависящим только от передаваемого импульса  $q$  и разности координат:

$$r = r_e - r_p. \quad (4.40a)$$

Следовательно, мы имеем

$$V_{k' k'' q} = V_q = \int \frac{dr}{\Omega} e^{iq \cdot r} V(r). \quad (4.40b)$$

Из-за симметрии подынтегрального выражения величина  $V_{k' k'' q}$  зависит только от модуля  $q$ .

Исследуем рассеяние электрона на сложном ядре, используя формулу первого порядка временной теории возмущений (аналогично тому, как мы поступали в случае  $\beta$ -распада). Рассмотрим квантовый переход из начального состояния  $|n_i, k''\rangle$ , имеющего одно сложное ядро, находящееся в состоянии  $|n_i\rangle$ , и электрон в состоянии с импульсом  $\hbar k''$ , в конечное состояние  $|n_f, k'' - q\rangle$ , имеющее сложное ядро, пребывающее в состоянии  $|n_f\rangle$ , и электрон в состоянии с импульсом  $\hbar(k'' - q)$ . Вероятность перехода в единицу времени находится по формуле «золотого правила»; она равна

$$W_{(n_i, k'') \rightarrow (n_f, k'' - q)} = \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} |V_q|^2 \rho_f \right\} \left\langle n_f \left| \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} \right| n_i \right\rangle^2. \quad (4.41a)$$

По аналогии с формулой (4.17) формулу (4.41a) можно записать в виде произведения *двух* сомножителей, т. е. в виде

$$W_{(n_i, k'') \rightarrow (n_f, k'' - q)} = W^F | \langle n_f | \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} | n_i \rangle |^2, \quad (4.41b)$$

где

$$W^F = \frac{2\pi}{\hbar} |V_q|^2 \rho_f. \quad (4.41b)$$

Первый множитель  $W^F$  в (4.41b) зависит только от величин, характеризующих кулоновское взаимодействие электрона с протоном, и от плотности конечных состояний рассеянного электрона; он описывает процесс рассеяния электрона на свободном протоне. Второй множитель в (4.41b) зависит только от начального и конечного состояний сложного ядра и от величины переданного ядру импульса. Он является квадратом так называемого «электрического формфактора» ядра. По аналогии с формулой (4.30) этот формфактор можно записать в представлении Шредингера, используя формулу

$$\langle n_f | \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} | n_i \rangle = \langle n_f | \sum_{j=1}^{Z_q} e^{iq \cdot x_j} | n_i \rangle, \quad (4.42)$$

в которой  $Z$  — полное число протонов в ядре, а суммирование проводится по всем протонам ядра.

Для упругого рассеяния, когда  $n_f = n_i$ , формфактор можно записать в следующем простом виде:

$$\langle n_i | \sum_{j=1}^Z e^{iq \cdot x_j} | n_i \rangle = \int \rho(x) e^{iq \cdot x} dx, \quad (4.43a)$$

где

$$\rho(x) = \sum_{j=1}^Z \int \psi_{n_j}^* \delta(x - x_j) \psi_{n_j} dx_1 \dots dx_A \quad (4.43б)$$

— плотность электрического заряда.

Из этих формул видно, что электрический формфактор представляет собой фурье-образ функции плотности электрического заряда в ядре. С помощью экспериментов по рассеянию электронов на ядрах можно, следовательно, найти распределение электрического заряда в ядре. Если величина переданного импульса мала, то, как и в случае эффекта Мессбауэра, мы можем определить только среднеквадратичный радиус пространственного распределения заряда. Если величина переданного импульса не мала, то мы получаем более полную информацию о форме функции распределения заряда.

В излагаемой здесь упрощенной теории мы пренебрегли спинами электрона и протона, их магнитными моментами и магнитным взаимодействием между ними. Если правильно учесть все эти факторы, то окажется, что имеются два вклада в вероятность процесса рассеяния, которые условно можно назвать «электрическим» и «магнитным» формфакторами. Электрический формфактор, как мы видели, характеризует распределение заряда в ядре. Магнитный формфактор характеризует распределение плотности магнитного момента в ядре.

В теории рассеяния электронов на ядрах в отличие от теории ядерного  $\beta$ -распада мы знаем точный вид гамильтониана взаимодействия (4.38), как говорят, исходя из первых принципов, так как знаем вид кулоновского взаимодействия и величину электрического заряда электрона и протона. Поэтому мы можем провести все необходимые вычисления по формуле (4.41) и найти искомые значения поперечного сечения для кулоновского рассеяния электрона на протоне в первом порядке теории возмущений.

Чтобы сделать это, прежде всего мы должны связать формулу (4.41) для вероятности перехода в единицу времени с эффективным сечением рассеяния. Так как волновая функция начального состояния «нормирована на ящик» объема  $\Omega$ , то вероятность того, что за единицу времени электрон пересечет единичную площадку, перпендикулярную направлению его движения, равна  $v_i/\Omega$ , где  $v_i$  — начальная скорость электрона. Будем считать, что масса ядра бесконечно велика, поэтому его скорость отдачи можно считать равной нулю. Сечение рассеяния по определению есть отношение вероятности данного квантового перехода в единицу времени к вероятности того, что электрон за единицу времени пересечет единичную площадку, перпендикулярную направлению его



движения. Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} \sigma(n_i, k'' \rightarrow n_f, k' - q) &= \\ &= \frac{2\pi\Omega}{\hbar v_i} |V_q|^2 \rho_f \left| \langle n_f | \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} | n_i \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Рассмотрим сечение рассеяния электрона в бесконечно малый элемент телесного угла  $\sin \theta d\theta d\phi$  в направлении, задаваемом углами  $\theta, \phi$ . Плотность конечных состояний определяется тогда формулами

$$\rho_f dE_f = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} k_f^2 dk_f \sin \theta d\theta d\phi, \quad (4.45a)$$

$$\rho_f = \frac{\Omega}{\hbar^2 c^2 (2\pi)^3} k_f E_f \sin \theta d\theta d\phi, \quad (4.45b)$$

в которых  $\hbar k_f$  и  $E_f$  — величина импульса и энергия электрона в конечном состоянии; они связаны следующими релятивистскими соотношениями:

$$k_f = |k'' - q|, \quad (4.46a)$$

$$\hbar c k_f d(\hbar c k_f) = E_f dE_f. \quad (4.46b)$$

Скорость электрона  $v_f$  в конечном состоянии можно найти из соотношения

$$\frac{v_f}{c} = \frac{\hbar k_f c}{E_f}. \quad (4.46b')$$

Подставляя (4.45) и (4.46) в (4.44), получаем для дифференциального сечения рассеяния в единичный телесный угол в направлении  $\theta, \phi$  формулу

$$\begin{aligned} \sigma_{n_i \rightarrow n_f}(\theta, \phi) &= \frac{1}{(2\pi\hbar^2)^2} \left(\frac{v_f}{v_i}\right) \left(\frac{E_f}{c}\right)^2 \times \\ &\times |\Omega V_q|^2 \left| \langle n_f | \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} | n_i \rangle \right|^2. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Правую часть формулы (4.47) можно представить как произведение трех множителей, физический смысл которых совершенно различен. Первый множитель — чисто кинематический, он зависит только от начальной и конечной скоростей и энергии электрона. Второй множитель зависит от вида взаимодействия электрона с протоном. С помощью формулы (4.39) легко видеть, что нормировочный объем  $\Omega$ , как и следовало ожидать, фактически выпадает из этого множителя, и поэтому последний зависит только от величины передаваемого импульса  $q$ . (Этот результат совершенно общий и остается справедливым не только для кулоновского взаимодействия. В этом можно убедиться, заменив куло-

новский потенциал  $1/r$  произвольным потенциалом  $U(r)$ , зависящим только от расстояния между электроном и протоном.) Третий множитель — формфактор ядра, который зависит только от величины передаваемого импульса  $q$  и свойств исследуемого связанного состояния. Он не зависит от других кинематических переменных или каких-либо особенностей элементарного процесса рассеяния. Формула (4.47) нерелятивистская только в том отношении, что мы использовали нерелятивистский матричный элемент (4.40) для кулоновского взаимодействия. Все остальные множители релятивистские, поэтому формулу (4.47) очень легко обобщить на релятивистский случай: надо только подставить в нее релятивистское выражение для  $V_{k'k''q}$ .

Принципиально важным приближением при выводе формулы (4.47) было наше допущение о том, что уже в первом приближении теории возмущений получается правильный результат, т. е. что можно пренебречь поправками высших порядков. В теории рассеяния такое приближение обычно называется «борновским приближением». Для борновского приближения характерна фигурирующая в формуле (4.47) зависимость от кинематических множителей. Величина  $v_i/E_f$  зависит только от величины передаваемого импульса  $q$  и не зависит от потенциала взаимодействия и формфактора связанного состояния. Таким образом, применимость борновского приближения всегда легко экспериментально проверить, измеряя величину  $v_i/E_f$  при различных значениях энергии падающего электрона и при таких углах рассеяния, чтобы величина передаваемого импульса оставалась одной и той же. Если борновское приближение применимо, то результат всех этих измерений должен быть одинаков. Если учесть отдачу ядра и релятивистские эффекты, то формулу для сечения рассеяния в борновском приближении все равно можно представить в виде произведения некоторого известного кинематического множителя, умноженного на неизвестную, но вполне определенную функцию передаваемого импульса  $q$ , а следовательно, справедливость борновского приближения можно экспериментально проверить тем же способом, т. е. измеряя значения соответствующего кинематического множителя.

Используем теперь формулу (4.47) для исследования нерелятивистского упругого кулоновского рассеяния. В этом случае  $v_i = v_f$  и  $E_f = mc^2$ , где  $m$  — масса электрона. Вычислим интеграл в формуле (4.40б), для чего перейдем к сферическим координатам с полярной осью, направленной вдоль импульса  $q$ ; интегрирование по углам проводится элементарно и дает

$$V_{k'k''q} = -e \int_{\Omega} \frac{e^{iqr \cos \theta}}{r} r^2 \sin \theta d\theta d\phi = -\frac{4\pi e^2}{q} \int_0^R \sin qr dr. \quad (4.48)$$

Мы видим, что интеграл по радиальной переменной очень чувствителен к выбору верхнего предела  $R$ , который определяется линейными размерами нормировочного ящика. Эта трудность, очевидно, носит не физический, а *математический* характер; мы ее обойдем с помощью следующего приема: умножим подынтегральное выражение на «экранирующий» множитель  $e^{-\kappa r}$  и устремим размеры ящика к бесконечности. Затем перейдем к пределу  $\kappa \rightarrow 0$ . Тогда получим

$$V_{k^*k^*q} = -\frac{4\pi e^2}{q} \lim_{\kappa \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-\kappa r} \sin qr \, dr = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left( -\frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa^2} \right), \quad (4.49a)$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (4.49b)$$

Использованный нами прием имеет простой физический смысл. Трудность, с которой мы столкнулись, связана тем обстоятельством, что кулоновское взаимодействие имеется и на бесконечности. Вместе с тем во всех практически интересных случаях потенциал кулоновского взаимодействия не продолжается до бесконечности, так как кулоновское поле ядра всегда экранируется атомными электронами. Даже если ядро-ион заключено в кристаллической решетке или находится в ионном пучке, его кулоновское поле все равно экранировано на больших расстояниях хотя бы стенками прибора. Поэтому формула (4.49a) с малым, но конечным параметром  $\kappa$ , по-видимому, больше соответствует действительности, чем формула (4.48), в которой не учитываются эффекты экранирования. Из формулы (4.49a) видно, что эффекты экранирования будут очень слабо влиять на процесс рассеяния, когда  $\kappa \ll q$ , т. е. в том случае, когда экранирующий множитель будет очень мало меняться на расстоянии, равном периоду функции  $\sin qr$ . В этом случае формула (4.49b) дает удовлетворительное приближение. Формулу (4.49a) с конечным значением  $\kappa$  можно использовать для описания рассеяния на экранированном атомными электронами ядре, причем величину  $\kappa$  следует найти исходя из какой-то конкретной модели атома. Мы, однако, предположим, что радиус экранирования большой, и будем пользоваться просто формулой (4.49b).

Подставляя формулу (4.49b) в (4.47), получаем следующую формулу для сечения упругого рассеяния:

$$\sigma_{\text{упр}}(\theta, \phi) = \left( \frac{2me^2}{q^2} \right)^2 \left| \langle n_i | \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} | n_i \rangle \right|^2. \quad (4.50a)$$

Используя подстановку

$$\hbar q = 2mv \sin \frac{1}{2} \theta, \quad (4.50b)$$

сечение (4.50а) можно выразить в виде функции от скорости электрона и угла рассеяния

$$\sigma_{\text{упр}}(\theta, \phi) = \left( \frac{e^2}{2mv^2} \right)^2 \left( \operatorname{cosec}^4 \frac{1}{2} \theta \right) \left| \langle n_i | \sum_{k'} a_{k'+q}^\dagger a_{k'} | n_i \rangle \right|^2. \quad (4.50в)$$

Это в точности формула Резерфорда для кулоновского рассеяния, умноженная на квадрат формфактора, характеризующего передачу протону импульса, равного  $q$ . Если ядро считать «точечным», то плотность его электрического заряда описывается  $\delta$ -функцией, и формфактор просто равен постоянной  $Z$ , т. е. не зависит от  $q$ . В этом случае формула (4.50в) переходит в формулу Резерфорда для рассеяния электрона на кулоновском потенциале ядра, имеющего заряд  $Ze$ .

# **III. Квантовая механика многочастичных систем в изложении для пешеходов (часть 1)**

## **Введение**

В этом разделе изложена квантовомеханическая теория систем многих частиц, которая, с одной стороны, служит основой современной атомной и ядерной физики и физики твердого тела, а с другой стороны, является той теорией, с помощью которой проверяются основные принципы релятивистской квантовой механики и теории поля. Раздел включает две части. В гл. 5 и 6 излагаются на элементарном уровне основы метода вторичного квантования и рассматриваются его простейшие приложения. В гл. 9—11 обсуждаются более сложные методы и их приложения.

Вторичное квантование вводится вне всякой связи с теорией поля просто как метод, который позволяет описывать тождественные, т. е. неразличимые, частицы без использования нефизичных индексов, нумерующих эти частицы. Поэтому читатель, приступающий к изучению квантовой теории систем многих частиц, знакомится сразу с таким математическим формализмом, в котором принцип неразличимости частиц учтен с самого начала, так что впоследствии читателю не придется путаться с условиями симметрии волновых функций. Получая затем (на элементарном уровне) следствия, вытекающие из принципа неразличимости квантовых частиц, мы находим коммутационные и антикоммутационные соотношения для бозонных и фермионных операторов, ограничения на симметрию двухчастичных состояний, эффект увеличения матричных элементов бозонных операторов (при наличии нескольких частиц, находящихся в одном и том же состоянии) и выражения для обменных членов (появляющихся при вычислении матричных элементов двухчастичных операторов).

Имея в виду дальнейшие приложения, мы подробно останавливаемся на выяснении особой роли вакуумного состояния и опи-

сываем метод вычисления матричных элементов путем сведения их к среднему по вакуумному состоянию. Мы вводим понятие «условного вакуума», вначале используя его просто как способ избежать рассмотрения не играющих никакой роли «частиц, находящихся на Луне», а затем как полезный метод приближенного описания атомных и ядерных конфигураций с заполненными оболочками. Познакомившись с теорией «формального вакуума», предназначенной для описания систем со многими степенями свободы, которые могут быть поляризованы и возбуждены, читатель сможет лучше ориентироваться в вопросах, разбираемых в дальнейших главах.

В гл. 6 проиллюстрированы широкие возможности, которые предоставляет формализм вторичного квантования для построения единой квантовой теории систем многих частиц (вне зависимости от того, сколько частиц действительно имеется в наличии в системе) и для построения теории так называемых «композитных» квантовых систем, примером которых служит дейтрон. Мы находим ответ на простой вопрос, «является ли дейтрон бозоном или фермионом», построив в явном виде соответствующие операторы рождения и уничтожения дейтронов и вычислив их коммутаторы. Сделав заключение, что дейтроны — это «почти, но не совсем бозоны», мы выясняем как сходство свойств дейтронов со свойствами бозонов, так и различие этих свойств и показываем, что различиями между свойствами бозонов и дейтронов можно пренебречь в случае малой плотности дейтронов, что имеет место всегда во всех физических задачах, относящихся к реальным дейтронам. Далее мы находим, что *общее правило*, согласно которому композитная система, содержащая нечетное число фермионов, обладает фермионными свойствами, а композитная система, содержащая четное число фермионов, ведет себя как бозон, справедливо, если *перекрываем* волновых функций различных композитных систем можно пренебречь. Случай высокой плотности перекрывающихся друг с другом «фермионных пар» (который не играет никакой роли в теории дейтронов) представляет интерес в теории парных корреляций, встречающихся в сверхпроводниках и в ядрах. Мы показываем, что многие качественные особенности теории сверхпроводимости БКШ являются естественным следствием *промежуточного* поведения «фермионных пар», которые представляют собой и не бозоны, и не фермионы, а нечто «промежуточное». Рассматриваемая нами упрощенная модельная теория взаимодействия таких пар, для которой можно точно найти собственные функции соответствующей многочастичной системы с помощью метода квазиспина, часто используемого в настоящее время в ядерной физике, позволяет познакомиться со многими физическими особенностями теории числа «сеньорити» для ядер и теории сверхпроводимости для металлов.

Изложение более полной квантовой теории многих частиц мы начинаем в гл. 9 с обсуждения вопроса о том, какого рода информацию мы хотим получить о квантовой системе многих частиц, так как весь огромный объем информации о системе, который содержится в полной многочастичной волновой функции, все равно получить невозможно, да и в этом нет никакой необходимости. Затем мы рассматриваем невзаимодействующий ферми-газ и вводим «формализм частиц и дырок». Мы несколько необычным способом излагаем известные приближенные методы Томаса — Ферми и Хартри — Фока, используя существенно формализм вторичного квантования, а затем показываем, что применяемый нами подход эквивалентен методу самосогласованного поля. В гл. 9 рассмотрены приложения этих приближенных методов к двум классам физических систем:

1. К атомным и ядерным квантовым системам частиц, которые содержат небольшое число частиц и которые обладают сферической симметрией. Орбитали отдельных составляющих частиц в этих системах являются собственными функциями момента количества движения, и структуру этих систем частиц удобно описывать с помощью оболочек.

2. К твердым телам и ядерной материи, которые являются квантовыми системами, состоящими из очень большого числа частиц и обладающими трансляционной симметрией. Орбитали отдельных частиц в этих системах являются собственными функциями импульса.

Мы подробно рассматриваем два характерных примера квантовых систем многих частиц двух этих типов: *конечное ядро* и *электронный газ* и последовательно сопоставляем их в ходе всего нашего рассмотрения с тем, чтобы показать сходство и различия в приложении к этим системам методов, которые формально одинаковы как в теории конечных, так и в теории бесконечных систем.

В гл. 10 и 11 мы изучаем корреляционные эффекты, которые не учитываются в приближении Хартри — Фока, и описываем некоторые методы, имеющиеся в настоящее время в теории таких эффектов.

В гл. 10 изложен метод, с помощью которого описываются парные корреляции в теории сверхпроводимости БКШ. При этом показывается, что в пределе сильной связи из него получается та упрощенная модель, которая рассматривается в гл. 6. Как обобщение упрощенной теории, мы вводим волновую функцию БКШ и преобразование Боголюбова — Валатина <sup>1)</sup> и рассматри-

---

<sup>1)</sup> Здесь очевидная несправедливость. Валатин в своей работе 1958 г. независимо от работ Боголюбова, опубликованных в начале 1958 г., предложил известные формулы канонического преобразования для ферми-операторов. Однако при этом он непосредственно исходил из аналогичных формул

ваем простейшие приложения развиваемой теории к сверхпроводникам и ядрам.

В гл. 11 описывается теория возбуждений пар «частица — дырка» в многочастичной фермионной системе, которые обычно изучают с помощью приближения хаотических фаз. Затем мы излагаем метод «элементарных возбуждений»; при исследовании многочастичной квантовой системы этим методом интересуются не свойствами точного основного или возбужденного состояний системы, а свойствами возбуждений, вызываемых операторами простого вида, соответствующими простейшим физическим механизмам возбуждения, например возбуждению многочастичной системы налетающим фотоном. Затем мы рассматриваем «гигантские резонансы», а также «коллективные» и «одночастичные» элементарные возбуждения.

Используя метод формальной линеаризации «уравнений движения» для квантовой системы многих частиц, мы вводим приближение хаотических фаз и рассматриваем его приложения к конечному ядру и к электронному газу. Гл. 11 заканчивается кратким обзором более сложных методов изучения корреляций в квантовых многочастичных системах, а именно методов зависящего от времени приближения Хартри — Фока, правил сумм, временной теории элементарных возбуждений, спектральных функций и функций Грина.

Многие методы и понятия, рассмотренные в этом разделе, полезны не только в задачах квантовой теории многих частиц. Они облегчают читателю изучение релятивистской квантовой механики и квантовой теории поля. Использование формализма вторичного квантования позволяет существенно упростить изложение временной теории возмущений в гл. 7, так как с помощью формализма вторичного квантования можно легко описывать процессы, в которых изменяется число участвующих частиц. Понятия условного вакуума, частиц и дырок и временная теория элементарных возбуждений используются в гл. 12 и 13.

---

Боголюбова для бозе-операторов, полученных еще в 1947 г. Наметившаяся в современной литературе тенденция сводить достижения Боголюбова в создании современной микроскопической теории сверхпроводимости к так называемым преобразованиям Боголюбова — Валадина ничем не может быть оправдана. Теорию БКШ нужно называть теорией БКШ-Боголюбова.—  
*Прим. ред.*



## Глава 5. ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ И ФОРМАЛИЗМ ВТОРИЧНОГО КВАНТОВАНИЯ

### § 1. Введение

В квантовой механике состояние двухчастичной системы можно описать предингеровской волновой функцией  $\psi(x_1, x_2)$ , которая является функцией координат обеих частиц. Квадрат волновой функции дает вероятность того, что частица 1 находится в точке  $x_1$ , а частица 2 в это же время находится в точке  $x_2$ . Рассмотрим теперь две *тождественные*, т. е. неразличимые, частицы, например два электрона в атоме гелия. Этим электронам на самом деле нельзя приписать никаких номеров, т. е. нельзя указать, какой из них 1, а какой 2. Двухэлектронное состояние будет полностью задано уже тем, что мы скажем, что один электрон находится в точке  $a$ , а другой — в точке  $b$ . Множество значений функции  $\psi(x_1, x_2)$  избыточно: два ее значения  $\psi(a, b)$  и  $\psi(b, a)$  характеризуют в действительности только одну амплитуду вероятности того, что один электрон находится в точке  $a$ , а другой — в точке  $b$ . Следовательно, значения  $\psi(a, b)$  и  $\psi(b, a)$  не могут задаваться произвольно. Они должны отличаться только фазовым множителем, так как их модули описывают одну и ту же физическую величину. Таким образом

$$|\psi(a, b)| = |\psi(b, a)|. \quad (5.1)$$

Избыточность множества значений волновой функции  $\psi(x_1, x_2)$  обычно устраняют, потребовав, чтобы волновая функция  $\psi(x_1, x_2)$  была *симметрична* или *антисимметрична* относительно перестановки ее аргументов  $x_1$  и  $x_2$ .

Для системы, составленной из большого числа тождественных частиц, использование функции  $\psi(x_1, x_2, \dots, x_n)$  также сопряжено с неудобствами, так как опять имеется избыточное множество ее значений. Абсолютная величина этой волновой функции не должна меняться при любых перестановках ее аргументов, так как всем этим перестановкам соответствует одна и та же физическая амплитуда вероятности, т. е. мы имеем

$$|\psi(x_1, x_2, \dots, x_n)| = |\psi(x_2, x_1, \dots, x_n)| \text{ и т. д.} \quad (5.2)$$

Эту избыточность значений многочастичной волновой функции обычно устраняют, потребовав, чтобы волновая функция была

*симметричной* или *антисимметричной* относительно перестановок ее аргументов. Вместе с тем, разумеется, более удобно было бы описывать систему тождественных частиц, вводя в рассмотрение непосредственно амплитуды вероятностей обнаружить одну частицу в точке  $a$ , а другую в точке  $b$ , не снабжая частицы нефизическими номерами, например 1 и 2, и затем устраняя возникающую избыточность описания с помощью добавочного требования, чтобы при перестановках аргументов не менялось абсолютное значение функции.

Шредингеровские многочастичные волновые функции также очень неудобны для описания процессов, в которых может изменяться число частиц, например для процессов излучения и поглощения фотонов или мезонов или для процессов рождения и уничтожения электрон-позитронных пар. Чтобы описать стационарные состояния для этих процессов, имеющих различное число частиц в начале и в конце, мы должны суметь отнести их к какому-то одному гильбертову пространству и научиться их связывать операторами, изменяющими число частиц. Обычно такие процессы рассматриваются в рамках квантовой теории поля.

Приступим теперь к изложению особого математического формализма, который называют *формализмом вторичного квантования* или *формализмом чисел заполнения* и который позволяет избежать всех вышеуказанных трудностей, возникающих в шредингеровском представлении. Операторы рождения и уничтожения частиц можно формально ввести очень просто, не углубляясь в детали квантовой теории поля, как удобные обозначения при описании системы квантовых тождественных частиц. Используя формализм вторичного квантования для систем тождественных частиц, мы можем избежать избыточности математического описания, о которой говорилось выше, и очень просто рассматривать процессы, при которых изменяется число частиц.

## § 2. Вакуумное и одночастичные состояния

Начнем с того, что рассмотрим вектор состояния, описывающий «вакуумное состояние». Он обозначается следующим образом:

$$|0\rangle$$

и представляет состояние нашей квантовой многочастичной системы, вообще не содержащее ни одной частицы.

Рассмотрим теперь полный набор «одночастичных состояний». Используя шредингеровские волновые функции, мы можем взять, например, состояния

$$|k'\rangle = e^{ik' \cdot x}, \quad (5.3)$$

которые, как известно, образуют вместе полный набор состояний, называемых *плоскими волнами*. В формализме вторичного квантования эти состояния мы запишем следующим образом:

$$|k'\rangle \equiv a_{k'}^\dagger |0\rangle. \quad (5.4)$$

Оператор рождения  $a_{k'}^\dagger$  рождает частицу в одночастичном состоянии, описываемом плоской волной с волновым вектором  $k'$ . Таким образом, одночастичное состояние описывается как результат действия оператора рождения на вакуумное состояние. Совокупность одночастичных состояний (5.3), характеризуемых всеми возможными значениями волнового вектора  $k'$ , образует полный набор. Следовательно, формулой (5.4) мы задаем полный набор одночастичных состояний.

Бра-вектор, соответствующий кет-вектору (5.4), будем обозначать следующим образом:

$$\langle k'| \rightarrow \langle 0| a_{k'}, \quad (5.5)$$

где  $a_{k'}^\dagger$  — оператор, эрмитово-сопряженный оператору  $a_{k'}$ . Так как состояния (5.4) образуют ортонормированный набор, то должно выполняться соотношение

$$\langle 0| a_{k'} a_{k''}^\dagger |0\rangle = \delta_{k''k'} \quad (5.6)$$

Формулы (5.4) — (5.6) — это просто *новые* обозначения для одночастичных состояний, которые полностью эквивалентны шредингеровским обозначениям (5.3), причем эти новые обозначения не особенно облегчают расчеты для одночастичной системы. Формализм вторичного квантования становится полезным и удобным только при описании систем, содержащих две или более частиц.

При введении операторов рождения частиц в формализме вторичного квантования вовсе не обязательно использовать базис из плоских волн. Функции любого другого базиса, который мы могли бы выбрать, всегда можно записать в виде линейных комбинаций плоских волн. Аналогично и операторы рождения, соответствующие такому новому базису, можно выразить через линейные комбинации операторов  $a'$ . Возьмем, например, новый набор базисных векторов  $|n'\rangle$ :

$$|n'\rangle = \sum_{k'} |k'\rangle \langle k'|n'\rangle. \quad (5.7)$$

Тогда соответствующий набор операторов рождения дается следующими линейными комбинациями операторов  $a_{k'}^\dagger$ :

$$a_{n'}^\dagger = \sum_{k'} a_{k'}^\dagger \langle k'|n'\rangle, \quad (5.8)$$

где коэффициенты разложения те же, что и в разложении (5.7). Оператор  $a_{n'}^\dagger$ , таким образом, рождает частицу в состоянии  $|n'\rangle$ .

Часто используется следующий набор одночастичных базисных векторов состояний:

$$|x'\rangle = (2\pi)^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik' \cdot x'} |k'\rangle dk'. \quad (5.9)$$

Соответствующие ему операторы рождения имеют вид

$$a^\dagger(x') = (2\pi)^{-3/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik' \cdot x'} a_k^\dagger dk'. \quad (5.10)$$

Следовательно, оператор  $a^\dagger(x')$  рождает частицу в пространственной точке  $x'$ . Конечно, нет никаких особых причин, почему мы пишем  $x'$  в скобках как аргумент, в то время как  $k'$  пишем как индекс: просто такие обозначения общеприняты.

### § 3. Двухчастичные и многочастичные состояния. Коммутационные и антикоммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения

Рассмотрим теперь полный набор состояний системы двух частиц. Используя шредингеровские волновые функции, мы можем взять в качестве такового полный набор стационарных состояний двух свободных частиц, описываемых плоскими волнами:

$$|k', k''\rangle = e^{ik' \cdot x_1} e^{ik'' \cdot x_2}. \quad (5.11)$$

Волновая функция (5.11) описывает состояние, в котором частица 1 обладает волновым вектором  $k'$ , а частица 2 обладает волновым вектором  $k''$ . Заданным значениям векторов  $k'$  и  $k''$  соответствуют два разных состояния: в одном частица 1 обладает волновым вектором  $k'$ , а частица 2 — волновым вектором  $k''$ , а в другом — наоборот. Будем считать теперь, что наши две частицы *неразличимы*, т. е. что в природе осуществляется из указанных двух только *одно* состояние, а именно состояние, в котором одна частица обладает волновым вектором  $k'$ , а другая — волновым вектором  $k''$ . Поэтому в шредингеровском представлении мы должны научиться оперировать двумя функциями вида (5.11), описывающими, однако, *одно и то же* физическое состояние; при использовании формализма вторичного квантования такой проблемы не возникает.

В формализме вторичного квантования будем записывать двухчастичные состояния следующим образом:

$$|k', k''\rangle \rightarrow a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger |0\rangle. \quad (5.12a)$$

В правой части (5.12a) имеются два оператора рождения, действующие на вакуумное состояние, в результате чего рождаются одна частица с волновым вектором  $k'$  и другая частица с волновым вектором  $k''$ . Номера 1 и 2 для частиц при этом не вводятся, и они нас больше не беспокоят. Однако следует учитывать, что одно и то же вторично квантованное двухчастичное состояние можно записать *двумя* способами. Для заданных векторов  $k'$  и  $k''$  мы имеем состояние (5.12a), а также состояние

$$|k'', k'\rangle \rightarrow a_{k''}^\dagger a_{k'}^\dagger |0\rangle. \quad (5.12b)$$

Векторы состояний (5.12a) и (5.12b) описывают одно и то же физическое состояние и даже совпадают, если два оператора рождения  $a_{k'}^\dagger$  и  $a_{k''}^\dagger$  коммутируют друг с другом. Следует подчеркнуть, однако, что для того, чтобы векторы состояний (5.12a) и (5.12b) описывали *одно и то же* физическое состояние, они не обязательно должны совпадать; они могут отличаться множителем. Векторы состояний будут отличаться множителем  $F$ , если операторы рождения удовлетворяют следующему коммутационному соотношению:

$$a_{k''}^\dagger a_{k'}^\dagger = F a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger. \quad (5.13a)$$

Это соотношение можно также переписать в виде

$$a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger = a_{k''}^\dagger a_{k'}^\dagger / F. \quad (5.13b)$$

Коммутационные соотношения (5.13a) и (5.13b) должны выполняться в любом базисе и должны быть инвариантными относительно преобразования (5.8) от одного базиса к другому. Отсюда следует, что множитель  $F$  не должен зависеть от  $k'$  и  $k''$ . Сравнивая формулы (5.13a) и (5.13b), мы видим, таким образом, что множитель  $F$  может принимать только значения  $\pm 1$ . Следовательно, возможны только два вида коммутационных соотношений для операторов рождения, а именно:

$$a_{k''}^\dagger a_{k'}^\dagger = a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger, \quad (5.14a)$$

$$\bar{a}_{k''}^\dagger a_{k'}^\dagger = -a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger. \quad (5.14b)$$

Таким образом, два оператора рождения могут либо *коммутировать* [см. (5.14a)], либо *антикоммутировать* [см. (5.14b)]. Частицы, операторы рождения которых *коммутируют*, называются *бозонами*; частицы, операторы рождения которых *антикоммутируют*, называются *фермионами*.

Эти простые правила коммутации операторов рождения позволяют сразу же установить ряд важнейших физических свойств квантовых многочастичных систем (состоящих из бозонов или фермионов). Посмотрим прежде всего, что дают соотношения (5.14) в случае  $k'' = k'$ . Формула (5.14а) для бозонов превращается в этом случае в тривиальное тождество. Для фермионов из формулы (5.14б) получаем

$$a_k^\dagger a_{k'}^\dagger = -a_{k'}^\dagger a_k^\dagger = 0. \quad (5.15)$$

Следовательно, два фермиона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии.

Другое интересное свойство бозонов и фермионов мы установим, если запишем двухчастичное состояние, используя координату центра масс и относительную координату обеих частиц. Пусть  $2K$  означает волновой вектор движения центра масс, а  $2q$  — волновой вектор относительного движения. Тогда из коммутационных и антикоммутационных соотношений (5.14) получаем

$$a_{K+q}^\dagger a_{K-q}^\dagger = \pm a_{K-q}^\dagger a_{K+q}^\dagger, \quad (5.16)$$

где знак «плюс» берется для бозонов, а знак «минус» — для фермионов. Построим теперь такое двухчастичное состояние, для которого движение центра масс будет описываться плоской волной, а относительное движение — некоторым волновым пакетом:

$$\sum_q g(q) a_{K+q}^\dagger a_{K-q}^\dagger |0\rangle = \pm \sum_q g(q) a_{K-q}^\dagger a_{K+q}^\dagger |0\rangle, \quad (5.17a)$$

$$= \pm \sum_q g(-q) a_{K+q}^\dagger a_{K-q}^\dagger |0\rangle, \quad (5.17b)$$

где  $g(q)$  — некоторая функция  $q$ . Формула (5.17а) получается из формулы (5.16). Формула (5.17б) получается заменой знака индекса суммирования  $q$  в сумме (5.17а). Из (5.17б) следует, что функция  $g(q)$  должна быть четной функцией  $q$  для бозонов и нечетной функцией  $q$  для фермионов. (Мы пренебрегаем здесь возможностью существования других степеней свободы, необходимых для однозначного описания состояний частиц, например их спинами. Для частицы со спином соотношения (5.16) справедливы только в том случае, если обе частицы находятся в одинаковом спиновом состоянии.)

Так как четность функции  $g(q)$  непосредственно связана со значением орбитального момента количества движения, то отсюда следует, что орбитальный момент количества относительного движения должен быть четным для бозонов и нечетным для фермионов. Обратите внимание на то, что процедура изменения знака импульса относительного движения эквивалентна процедуре перестановки между собой обеих частиц и что функция  $g(q)$  —

это просто шредингеровская волновая функция относительного движения, записанная в импульсном пространстве. Следовательно, можно сказать, что бозонная волновая функция должна быть *симметричной* относительно перестановки частиц, а фермионная волновая функция — *антисимметричной* относительно такой же перестановки.

В шредингеровском представлении свойства симметрии волновых функций вводятся в теории постулативно. При работе со шредингеровскими волновыми функциями, описывающими несколько частиц, всегда необходимо помнить, что они удовлетворяют определенным требованиям симметрии. В формализме вторичного квантования свойства симметрии автоматически вытекают из коммутационных и антикоммутационных соотношений (5.14). Любой вектор состояния, записанный в формализме вторичного квантования, автоматически удовлетворяет требованиям симметрии.

Бра-вектор, соответствующий кет-вектору (5.12а), — это вектор, эрмитово-сопряженный вектору (5.12а); он записывается следующим образом:

$$\langle k', k'' | \rightarrow \langle 0 | a_{k''} a_{k'} \quad (5.18)$$

Норма данного вектора состояния равна скалярному произведению векторов (5.18) и (5.12а):

$$\langle 0 | a_{k''} a_{k'} a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger | 0 \rangle \equiv N_{k' k''} \quad (5.19а)$$

Величина нормировочной константы  $N_{k' k''}$  выбирается из соображений удобства. Более общая формула, включающая в себя условие ортогональности, имеет следующий вид:

$$\langle 0 | a_{k''} a_{k'} a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger | 0 \rangle = N_{k' k''} \delta_{k'' k'}. \quad (5.19б)$$

Входящее в (5.19б) вакуумное среднее — это скалярное произведение двух двухчастичных векторов состояний. Однако его мы можем рассматривать также как скалярное произведение кет-состояния, полученного действием сператора  $a_{k''}^\dagger$  на правое вакуумное состояние, и бра-состояния, которое получено при действии остальных трех операторов (двух рождения и одного уничтожения) на левое вакуумное состояние. При такой интерпретации наше вакуумное среднее равно скалярному произведению некоторых двух одночастичных состояний, а формула (5.19) выражает просто условие их ортонормировки. Состояние, получаемое при действии трех операторов (двух рождения и одного уничтожения) на вакуумное состояние, имеет вид

$$a_{k''} a_{k'}^\dagger a_{k''}^\dagger | 0 \rangle = N_{k' k''} a_{k''}^\dagger | 0 \rangle. \quad (5.20)$$

Из формул (5.18) — (5.20), таким образом, мы непосредственно видим, что оператор уничтожения  $a_{k'}$  можно рассматривать либо как оператор рождения, действующий на левый вакуумный вектор, либо как оператор уничтожения, действующий на правый вакуумный вектор. При действии на левый вакуумный вектор этот оператор *увеличивает* полное число частиц в системе на единицу; при действии на правый вакуумный вектор он *уменьшает* это число на единицу. Действуя на вакуумное состояние, оператор уничтожения должен давать нуль, так как он не может уменьшить числа частиц; действуя на одночастичное состояние, он может дать только вакуумное состояние или нуль. Следовательно, мы имеем

$$a_{k'} | 0 \rangle = 0, \quad (5.21a)$$

$$a_{k'} a_{k''}^\dagger | 0 \rangle = \delta_{k', k''} | 0 \rangle, \quad (5.21b)$$

где коэффициент, стоящий перед состоянием  $| 0 \rangle$  в правой части (5.21b), получается из условия ортонормировки одночастичных состояний [см. (5.6)].

Рассмотрим теперь коммутационные и антикоммутационные соотношения операторов уничтожения. Для двух операторов уничтожения они получаются непосредственно из соотношений (5.14) для двух операторов рождения; нужно только применить операцию эрмитова сопряжения. Таким образом, легко видеть, что два оператора уничтожения *коммутируют* в случае бозонов и *антикоммутируют* в случае фермионов, т. е. они ведут себя в точности так же, как соответствующие операторы рождения.

Рассмотрим, наконец, коммутационные и антикоммутационные соотношения для одного оператора рождения и одного оператора уничтожения. Из (5.21) непосредственно получаем

$$(a_k a_{k''}^\dagger + a_{k''}^\dagger a_k) | 0 \rangle = (a_k a_{k''}^\dagger - a_{k''}^\dagger a_k) | 0 \rangle, \quad (5.22a)$$

$$(a_k a_{k''}^\dagger + a_{k''}^\dagger a_k) | 0 \rangle = \delta_{k, k''} | 0 \rangle, \quad (5.22b)$$

причем первая формула справедлива для фермионов, а вторая для бозонов. Формула (5.22) показывает, как действует коммутатор или антикоммутатор рассматриваемых операторов на вакуумное состояние, и с ее помощью, очевидно, нельзя установить вид требуемых коммутационных соотношений. Найдем результат действия коммутатора бозонных операторов и антикоммутатора фермионных операторов на произвольное одночастичное состояние. Используя (5.14), (5.20) и (5.21), получаем

$$\begin{aligned} (a_k a_{k''}^\dagger \mp a_{k''}^\dagger a_k) a_{k''}^\dagger | 0 \rangle &= (\pm a_k a_{k''}^\dagger a_{k''}^\dagger \mp a_{k''}^\dagger) | 0 \rangle = \\ &= \pm (N_{k', k''} - 1) a_{k''}^\dagger | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (5.23)$$



где верхний знак берется для бозонов, а нижний — для фермионов. Из формулы (5.23) видно, что желательно, конечно, выбрать величину нормировочной константы  $N_{k'k''}$  так, чтобы коммутатор для бозонных операторов и антикоммутатор для фермионных операторов были бы просто числами, не зависящими от выбора состояния, на которое коммутатор или антикоммутатор действует. Сравнивая (5.22) и (5.23), видим, что для вакуумного состояния и одночастичных состояний этого можно добиться, положив

$$N_{k'k''} = 1 \pm \delta_{k'k''}. \quad (5.24)$$

Таким образом,  $N_{k'k''} = 1$ , если только  $k' \neq k''$ . При  $k' = k''$  имеем  $N_{k'k''} = 2$  для бозонов и  $N_{k'k''} = 0$  для фермионов. Такого результата для фермионов, конечно, следовало ожидать, так как два фермиона не могут занимать одно и то же состояние. Тот факт, что нормировочная константа в случае бозонов равна 2, приводит к интересному физическому следствию, которым мы займемся немного позже. Образно говоря, два бозона как бы «предпочитают» находиться в одном и том же квантовом состоянии, в то же время фермионы «лишены возможности» это сделать.

Итак, полностью правила коммутации и антикоммутации для бозонных и фермионных операторов имеют следующий вид:

$$a_{k''}^{\dagger} a_{k'}^{\dagger} \mp a_{k''}^{\dagger} a_{k'}^{\dagger} = 0 = a_{k'} a_{k''} \mp a_{k''} a_{k'}, \quad (5.25a)$$

$$a_{k'} a_{k''}^{\dagger} \mp a_{k''}^{\dagger} a_{k'} = \delta_{k'k''}, \quad (5.25b)$$

где знак «плюс» берется для фермионов, а знак «минус» — для бозонов. Коммутационные и антикоммутационные соотношения (5.25) инвариантны относительно преобразований вида (5.8), описывающих переход от старого к новому набору базисных состояний.

Как мы сказали, из формулы (5.24) получается интересное следствие в отношении бозонов:

$$\langle 0 | a_{k'} a_{k'} a_{k'}^{\dagger} a_{k'}^{\dagger} | 0 \rangle = 2 \langle 0 | a_{k'} a_{k'}^{\dagger} | 0 \rangle = 2, \quad (5.26a)$$

или, в более общем виде,

$$\langle 0 | (a_{k'})^n (a_{k'}^{\dagger})^n | 0 \rangle = n!. \quad (5.26b)$$

Эти формулы очень похожи на формулы для гармонического осциллятора. Как видно из (5.26b), нормированный вектор состояния, описывающий состояние с  $n$  бозонами, находящимися в одном и том же квантовом состоянии  $k'$ , должен иметь нормировочный множитель  $(n!)^{-1/2}$ . Следовательно, его можно записать в виде

$$(n!)^{-1/2} (a_{k'}^{\dagger})^n | 0 \rangle. \quad (5.27)$$

Вообще нормированный вектор состояния, который описывает  $n'$  бозонов в состоянии  $|k'\rangle$ ,  $n''$  бозонов в состоянии  $|k''\rangle$  и т. д., имеет вид

$$(n'! n''! \dots)^{-1/2} (a_{k'}^\dagger)^{n'} (a_{k''}^\dagger)^{n''} \dots |0\rangle. \quad (5.28)$$

В отношении фермионов проблемы нахождения нормировочного множителя не возникает, так как в любом квантовом состоянии не может быть больше одной частицы.

Состояния системы, состоящей из *трех* и *более* тождественных частиц, получаются в результате действия некоторого числа операторов рождения на вакуумное состояние. Из коммутационных и антикоммутационных соотношений (5.25) для операторов рождения и уничтожения вытекают все свойства таких состояний.

#### § 4. Линейные одночастичные операторы в формализме вторичного квантования

Посмотрим теперь, как в формализме вторичного квантования записывать через операторы рождения и уничтожения различные операторы, соответствующие наблюдаемым физическим величинам. Рассмотрим вначале одночастичные состояния. Любой линейный оператор, действующий на состояния одночастичной системы, полностью определяется своей матрицей или совокупностью матричных элементов (разумеется, при задании любой полной системы базисных одночастичных состояний). Данный оператор  $A$  действует на произвольный вектор состояния  $|\xi\rangle$  следующим образом:

$$A|\xi\rangle = \sum_{k'k''} |k''\rangle \langle k''|A|k'\rangle \langle k'|\xi\rangle. \quad (5.29)$$

В формализме вторичного квантования вектор состояния  $|\xi\rangle$  выражается формулой

$$|\xi\rangle \rightarrow \sum_{k'} \langle k'|\xi\rangle a_{k'}^\dagger |0\rangle. \quad (5.30a)$$

Следовательно, согласно (5.29), имеем

$$A|\xi\rangle \rightarrow \sum_{k''k'''} \langle k''|A|k'''\rangle \langle k'''\|\xi\rangle a_{k''}^\dagger |0\rangle. \quad (5.30б)$$

Используя (5.21б), эту формулу можно переписать немного иначе:

$$A|\xi\rangle \rightarrow \sum_{k''k'''} \langle k''|A|k'''\rangle (a_{k''}^\dagger a_{k''''}) \sum_{k'} \langle k'|\xi\rangle a_{k'}^\dagger |0\rangle. \quad (5.30в)$$

Отсюда непосредственно вытекает, что оператор  $A$  в формализме вторичного квантования представляется следующим оператором:

$$A|\xi\rangle \rightarrow \sum_{k'k''} \langle k''|A|k'\rangle a_{k''}^\dagger a_{k'}. \quad (5.31)$$

Формула (5.31) показывает, что оператор  $A$  представляет собой сумму операторных членов, каждый из которых описывает уничтожение частицы в некотором состоянии  $k'$  и рождение ее в другом состоянии  $k''$ . Амплитуда каждого операторного члена задается соответствующим матричным элементом оператора  $A$ , взятым между двумя одночастичными состояниями в шредингеровском представлении. Другими словами, матричный элемент оператора  $A$ , взятый между состояниями  $|k'\rangle$  и  $|k''\rangle$ , в точности равен составляющей вектора состояния  $A|k'\rangle$  по «направлению»  $|k''\rangle$ .

В качестве примера одночастичного оператора рассмотрим оператор импульса

$$p = \hbar \sum_{k'} k' a_{k'}^\dagger a_{k'}. \quad (5.32)$$

В формуле (5.32) мы имеем одинарную сумму, так как оператор импульса в рассматриваемом представлении плоских волн диагонален. В качестве другого примера возьмем оператор

$$\cos k \cdot x = \frac{1}{2} (e^{ik \cdot x} + e^{-ik \cdot x}) = \frac{1}{2} \sum_{k'} (a_{k'+k}^\dagger a_{k'} + a_{k'-k}^\dagger a_{k'}). \quad (5.33)$$

Этот оператор представляет собой сумму операторных членов двух типов. Первые увеличивают импульс частицы на  $k$ ; вторые уменьшают его на  $k$ . Матричные элементы этого оператора для всех состояний  $k'$  одинаковы.

Посмотрим теперь, как действует оператор  $A$ , определенный формулой (5.31), на двухчастичные состояния. Возьмем, например, двухчастичное состояние

$$|k''', k^{IV}\rangle \rightarrow a_{k'''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger |0\rangle. \quad (5.34)$$

Для него имеем

$$A|k''', k^{IV}\rangle \rightarrow \sum_{k', k''} \langle k''|A|k'\rangle a_{k''}^\dagger a_{k'} a_{k'''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger |0\rangle. \quad (5.35)$$

Оператор уничтожения  $a_{k'}$  при действии на вакуумное состояние  $|0\rangle$  дает нуль. Следовательно, в сумме (5.35) не обращаются в нуль только члены, для которых  $k' = k'''$  или  $k' = k^{IV}$ . С использова-

нием коммутационных или антикоммутационных соотношений (5.25) эти члены можно преобразовать к следующему виду:

$$A |k^m, k^{IV}\rangle \rightarrow \sum_{k''} \{ \langle k'' | A | k^m \rangle a_{k''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger \pm \langle k'' | A | k^{IV} \rangle a_{k''}^\dagger \dots a_{k^m}^\dagger | 0 \rangle \}, \quad (5.36a)$$

где знак «плюс» берется для бозонов, а знак «минус» — для фермионов. Формулу (5.36a) для бозонов и фермионов можно записать одинаково, если переставить операторы рождения во втором слагаемом в (5.36a):

$$A |k^m k^{IV}\rangle = \sum_{k''} \{ \langle k'' | A | k^m \rangle a_{k''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger + \langle k'' | A | k^{IV} \rangle a_{k''}^\dagger a_{k^m}^\dagger \} | 0 \rangle. \quad (5.36b)$$

Оба слагаемых в формуле (5.36) имеют очень простой физический смысл. Оператор  $A$ , будучи одночастичным оператором, изменяет состояние только одной частицы, так что в двухчастичной системе он может изменить состояние либо одной, либо другой частицы. В первом слагаемом в (5.36) оператор  $A$  изменяет состояние той частицы, которая первоначально находилась в состоянии  $k^m$ . Во втором слагаемом оператор  $A$  изменяет состояние частицы, которая первоначально находилась в состоянии  $k^{IV}$ . В предингеровском представлении волновые функции записываются в виде (5.11), частицы имеют номера 1 и 2 и оператор  $A$ , определенный (5.30), будет суммой двух операторов: действующего на частицу 1 и действующего на частицу 2, т. е. суммой вида

$$A = A(x_1, p_1) + A(x_2, p_2). \quad (5.37)$$

Первый оператор в сумме (5.37) действует на динамические переменные частицы 1, а второй, в точности такой же оператор, действует на переменные частицы 2.

Оператор  $A$ , определяемый формулой (5.31), действует на  $N$ -частичные состояния аналогично тому, как он действует на двухчастичные состояния. Результат его действия описывается формулой, являющейся простым обобщением формулы (5.36), т. е. дается суммой  $N$  членов, каждый из которых связан с изменением состояния одной из  $N$  частиц. В предингеровском представлении получается формула, обобщающая формулу (5.37) на случай  $N$  частиц, т. е. получается симметричная сумма  $N$  одночастичных операторов:

$$A = \sum_{i=1}^N A(x_i, p_i). \quad (5.38)$$

Операторы типа (5.31) поэтому часто и называются *одночастичными операторами*. В результате действия каждого такого опера-

тора на произвольное состояние системы производится такое изменение состояния каждой частицы в отдельности, которое задается соответствующим оператором для одночастичной системы.

Операторные слагаемые в (5.36), для которых  $k'' = k'''$  и  $k'' = k^{IV}$ , особенно интересны. В случае фермионов слагаемое с  $k'' = k'''$  во второй сумме в правой части формулы (5.36) обращается в нуль, так как два фермиона не могут заполнять одно и то же состояние. По аналогичной причине обращается в нуль и слагаемое с  $k'' = k^{IV}$  в первой сумме. Значит, хотя оператор  $A$  и действует на каждую частицу индивидуально, многочастичный характер системы все же проявляется в тех случаях, когда оператор  $A$  пытается перевести частицу в состояние, которое уже занято другой частицей. Для фермионов это невозможно, и соответствующие слагаемые обращаются в нуль.

В случае бозонов также наблюдаются особенности, когда оператор  $A$  пытается перевести частицу в состояние, уже занятое другой частицей. Для бозонов такой переход не запрещен; наоборот, он даже желателен. Это можно видеть из соотношений нормировки (5.26). В самом деле, норма состояния

$$a_{k''}^\dagger a_{k''}^\dagger | 0 \rangle \quad (5.39)$$

равна единице, если  $k'' \neq k'''$ . Однако если  $k'' = k'''$ , то норма этого состояния равна 2. Возьмем матричные элементы оператора (5.31) между состоянием  $|k'' k^{IV}\rangle$  и состоянием  $|k'' k^{IV}\rangle$  или  $|k'' k'''\rangle$ . Они равны скалярным произведениям последних состояний и состояния (5.36). Если все состояния  $k$  различны, то мы получаем

$$\langle k'' k^{IV} | A | k'' k^{IV} \rangle = \langle k'' | A | k'' \rangle, \quad (5.40a)$$

$$\langle k'' k''' | A | k'' k^{IV} \rangle = \langle k'' | A | k^{IV} \rangle. \quad (5.40b)$$

Мы видим, что рассматриваемые матричные элементы в точности равны матричным элементам оператора  $A$ , берущимся между соответствующими одночастичными состояниями. С другой стороны, когда конечное состояние содержит два бозона в одном и том же состоянии, то соотношение нормировки (5.26a) дает

$$\langle k^{IV} k^{IV} | A | k'' k^{IV} \rangle = \sqrt{2} \langle k^{IV} | A | k'' \rangle. \quad (5.41)$$

Следовательно, когда два бозона находятся в одном и том же состоянии, тогда появляется дополнительный множитель  $\sqrt{2}$ . Разумеется, этот описываемый сейчас нами эффект имеет место и в шредингеровском представлении, в котором частицы снабжены нефизическими номерами и в котором используются симметричные волновые функции для бозонов и антисимметричные для фермионов. Из симметрии или антисимметрии волновой функции мы сразу получаем результат: два фермиона не могут находиться

в одном и том же состоянии, в то время как два бозона имеют «повышенную» вероятность находиться в одном и том же состоянии.

Вероятность нахождения бозонов в одном и том же состоянии становится еще более значительной, когда речь идет не о двух бозонах, а о большем их числе. Норма состояния  $(n!)^{-1/2} (a_{k''}^\dagger)^n a_{k''} |0\rangle$  равна единице, если  $k'' \neq k'''$ , но если же  $k'' = k'''$ , то она равна  $n + 1$ . Рассуждая в точности так же, как при выводе (5.40) и (5.41), можно прийти к формуле, которая обобщает (5.40) на случай, когда в состоянии  $k''$  находится не одна, а  $n$  частиц. Из этой формулы легко видеть, что матричный элемент будет в  $(n + 1)^{1/2}$  раз больше, если частица, состояние которой изменяется при действии нашего оператора  $A$ , будет переходить в состояние, которое уже было занято до этого  $n$  частицами.

Весьма поучительно остановиться здесь на процедуре вычисления общего матричного элемента одночастичного оператора  $A$ , берущегося между двухчастичными состояниями. Рассмотрим простой матричный элемент  $\langle k^V k''' | A | k'' k^{IV} \rangle$ , в котором два одночастичных состояния  $k'''$  одинаковы в начальном и в конечном двухчастичных состояниях; мы видели выше [см. (5.36)], что оператор  $A$  может менять состояния только какой-то одной частицы. Потребуем, чтобы  $k^{IV} \neq k'''$  и  $k^{IV} \neq k^V$ . Используя формулу (5.31) для оператора  $A$  в формализме вторичного квантования, для нашего матричного элемента получаем

$$\langle k^V k''' | A | k'' k^{IV} \rangle = \langle 0 | a_{k^V} a_{k''} \sum_{k' k'''} \langle k'' | A | k' \rangle a_{k''}^\dagger a_{k'} a_{k'''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger | 0 \rangle, \quad (5.42a)$$

$$= \sum_{k' k''} \langle k'' | A | k' \rangle \langle 0 | a_{k^V} a_{k''} a_{k'''}^\dagger a_{k'} a_{k''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger | 0 \rangle. \quad (5.42b)$$

Таким образом, задача вычисления матричного элемента оператора  $A$  между двумя данными двухчастичными состояниями сводится к задаче вычисления среднего значения более сложного оператора, но по вакуумному состоянию. Это весьма характерно для формализма вторичного квантования, так как в нем состояния, стоящие слева и справа в любом матричном элементе, всегда можно представить как результат действия операторов рождения на вакуумные состояния. При расчетах вероятностей физических процессов в квантовой теории поля всегда возникают подобного вида «вакуумные средние» от произведений операторов рождения и уничтожения, причем имеется стандартный способ вычисления таких средних, известный под названием *теоремы Вика*, и мы сейчас его применим для расчета среднего в (5.42).

Согласно указанному способу, мы должны, используя коммутационные и антикоммутационные соотношения (5.25), переставить между собой операторы рождения и уничтожения так, чтобы

операторы уничтожения оказались справа, а операторы рождения — слева. Тогда вакуумное среднее от произведения полевых операторов, расположенных таким образом, будет равно нулю, ибо, во-первых, последний справа оператор — это оператор уничтожения, действующий на правый вектор вакуумного состояния, и, во-вторых, первый слева оператор — это оператор рождения, действующий на левый вектор вакуумного состояния; при действии обоих этих операторов получаем нуль. Таким путем можно исключить все вакуумные средние и у нас останутся только суммы произведений  $\delta$ -функций, возникающие от коммутаторов и антикоммутаторов.

Вычисление вакуумного среднего в (5.42) мы начнем с того, что переместим последний, т. е. самый правый, оператор рождения на самое крайнее левое место. При этом выкладку будем проводить одновременно для бозонов и фермионов, выписывая знак «плюс» для бозонов, а знак «минус» для фермионов:

$$\begin{aligned} \langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''} a_{k''m}^\dagger a_{k'IV}^\dagger | 0 \rangle &= \pm \langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''} a_{k'IV}^\dagger a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''}^\dagger a_{k'IV} a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle \pm \delta_{k'k'IV} \langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle = \\ &= \pm \langle 0 | a_{k'IV}^\dagger a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''} a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle \pm \delta_{k'k'IV} \langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (5.43a)$$

Первое слагаемое в правой части (5.43a) обращается в нуль, так как в нем оператор рождения непосредственно действует на левый вектор вакуумного состояния. Второе слагаемое можно упростить дальше, преобразуя его тем же способом, которым мы получили формулу (5.43a), а также используя формулу (5.21б). Будем иметь

$$\begin{aligned} \pm \delta_{k'k'IV} \langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle &= \\ &= \delta_{k'k'IV} [\langle 0 | a_k \nabla a_{k''}^\dagger a_{k'm} a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle \pm \delta_{k''k''m} \langle 0 | a_k \nabla a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle] = \\ &= \delta_{k'k'IV} [\langle 0 | a_k \nabla a_{k''}^\dagger | 0 \rangle \pm \delta_{k''k''m} \langle 0 | a_{k'IV}^\dagger a_{k''m}^\dagger | 0 \rangle] = \\ &= \delta_{k'k'IV} [\delta_{k'k''} \pm \delta_{k''k''m} \delta_{k''m}]. \end{aligned} \quad (5.43б)$$

Итак, окончательно получаем очень простой результат:

$$\langle 0 | a_k \nabla a_{k'm} a_k^\dagger a_{k''} a_{k''m}^\dagger a_{k'IV}^\dagger | 0 \rangle = \delta_{k'k'IV} \delta_{k'k''} [1 \pm \delta_{k''m} \delta_{k'V}] \quad (5.44a)$$

и

$$\langle k^V k'' | A | k'' k^IV \rangle = \langle k^V | A | k^IV \rangle \{1 \pm \delta_{k''k''} \nabla\}. \quad (5.44б)$$

Формула (5.44a) весьма типична при расчетах вакуумных средних. Формула (5.44б) дает нам как раз ожидаемый результат. Взятый нами матричный элемент одночастичного оператора (между заданными двухчастичными состояниями) в точности равен

матричному элементу этого оператора, взятому между теми *одночастичными состояниями*, которыми отличаются начальное и конечное двухчастичные состояния в исходном матричном элементе (при условии, конечно, что одночастичные состояния различны). Если эти одночастичные состояния не различны, т. е. мы имеем дело со случаем, когда две частицы находятся в одном и том же состоянии, то для фермионов рассматриваемый матричный элемент обращается в нуль из-за обращения в нуль дополнительного множителя в формуле (5.44б), а для бозонов матричный элемент за счет дополнительного множителя в (5.44б) увеличивается в 2 раза, как это мы уже получили в формуле (5.41).

### § 5. Операторы числа заполнения

Особый интерес представляет одночастичный оператор, который имеет следующий простой вид:

$$n_k = a_k^\dagger a_k. \quad (5.45)$$

Используя коммутационные и антикоммутационные соотношения (5.25) для операторов рождения и уничтожения, легко вывести следующие коммутационные соотношения для оператора  $n_k$ :

$$[n_k, a_{k'}^\dagger] = a_k^\dagger \delta_{kk'}, \quad (5.46a)$$

$$[n_k, a_{k'}] = -a_k \delta_{kk'}, \quad (5.46б)$$

$$[n_k, (a_k^\dagger)^m] = m (a_k^\dagger)^m. \quad (5.46в)$$

Соотношения (5.46а) — (5.46в) верны и для бозонных и для фермионных операторов. Оператор  $n_k$  квадратичен по этим операторам; в результате знаки «плюс — минус», имеющиеся в формулах (5.25), при вычислении коммутаторов (5.46) пропадают. Из формулы (5.46в) следует соотношение

$$n_k (a_k^\dagger)^m |0\rangle = m (a_k^\dagger)^m |0\rangle. \quad (5.47)$$

Таким образом, состояние, описывающее  $m$  частиц, находящихся в одном и том же одночастичном состоянии  $k$ , является собственным состоянием оператора  $n_k$  с собственным значением  $m$ . Оператор  $n_k$  называется «оператором числа заполнения» частицами состояния  $k$ . Его собственные значения — это число частиц, заполняющих состояние  $k$ . Любое состояние, которое имеет совершенно определенное число частиц в состоянии  $k$ , будет собственным состоянием оператора  $n_k$ . Согласно (5.46а), оператор  $n_k$  коммутирует со всеми операторами рождения частиц в состояниях  $k'$ , ортогональных состоянию  $k$ . Поэтому число частиц, находящихся в состоянии  $k$ , никак не зависит от того, сколько частиц находится в других состояниях.



Произвольное состояние не обязательно является собственным состоянием оператора  $n_k$ . В частности, состояния, являющиеся линейными комбинациями собственных состояний оператора  $n_k$ , соответствующих разным собственным значениям, не будут характеризоваться определенным числом заполнения частицами состояния  $k$ . Такие состояния могут, однако, оказаться нужными для описания квантовых многочастичных систем, в которых непрерывно совершаются переходы из одного собственного состояния оператора  $n_k$  в другое вследствие имеющегося межчастичного взаимодействия.

Рассмотрим теперь сумму всех операторов чисел заполнения, соответствующих полному набору состояний  $k$ :

$$N = \sum_{\text{по всем } k} n_k. \quad (5.48)$$

Это оператор «полного числа частиц в системе». Следовательно, произвольное состояние любой квантовой системы, имеющей вполне определенное число частиц, должно описываться таким вектором состояния, который является собственным вектором оператора  $N$  с собственным значением, как раз равным полному числу частиц в рассматриваемой системе. Таким образом, для тех физических систем, в которых частицы не рождаются и не уничтожаются (как, например, для электронов в атоме или в твердом теле или для нуклонов в ядре), точные собственные состояния системы<sup>1)</sup> должны быть одновременно и собственными состояниями оператора  $N$ .

Однако бывают случаи, когда удобно использовать векторы состояний, не являющиеся собственными состояниями оператора  $N$ , и описывать систему так, как будто в ней не фиксировано полное число частиц (даже для тех систем, в которых отдельные частицы не рождаются и не уничтожаются). Хотя для подобных систем состояния, являющиеся линейными комбинациями состояний с различным числом частиц, и не имеют непосредственно физического смысла, тем не менее использование этих векторов состояний может облегчить вычисления. Подобная ситуация возникает, например, в квантовой статистической механике, когда оказывается удобным использовать большой канонический ансамбль.

## § 6. Двухчастичные операторы в формализме вторичного квантования

Рассмотрим теперь операторы, которые действуют на состояния двухчастичной системы и могут изменять состояния обеих частиц одновременно. В шредингеровском представлении такого рода

<sup>1)</sup> То есть собственные состояния гамильтониана системы. — Прим. перев.

оператор имеет следующие матричные элементы:

$$\langle k^{IV} k'' | B | k'' k' \rangle. \quad (5.49a)$$

Поскольку в предингеровском представлении частицы снабжены номерами, имеет смысл рассматривать также матричный элемент типа (5.49a), в котором волновые векторы  $k''$  и  $k^{IV}$  переставлены:

$$\langle k'' k^{IV} | B | k'' k' \rangle. \quad (5.49b)$$

Чтобы выяснить, в чем различие этих двух матричных элементов, рассмотрим конкретный пример. Возьмем оператор, описывающий кулоновское взаимодействие

$$V = e^2/r_{12}, \quad (5.50)$$

которое имеется между двумя частицами с зарядами  $e$ , находящимися на расстоянии  $r_{12}$ . Составим выражения для матричных элементов оператора (5.50), используя в качестве базисных двухчастичных состояний плоские волны.

Рассмотрим сначала случай, когда одна из частиц — протон, а вторая — положительный пион. Матричные элементы для двухчастичной системы, состоящей из протона и пиона, имеют вид

$$\begin{aligned} \langle k_{\pi}^{IV} k_p'' | V | k_p'' k_{\pi}' \rangle = \\ = \int e^{-ik^{IV} \cdot r_1} e^{-ik'' \cdot r_2} \frac{e^2}{r_{12}} e^{ik'' \cdot r_2} e^{ik' \cdot r_1} dr_1 dr_2, \end{aligned} \quad (5.51a)$$

$$\begin{aligned} \langle k_{\pi}'' k_p^{IV} | V | k_p'' k_{\pi}' \rangle = \\ = \int e^{-ik'' \cdot r_1} e^{-ik^{IV} \cdot r_2} \frac{e^2}{r_{12}} e^{ik'' \cdot r_2} e^{ik' \cdot r_1} dr_1 dr_2. \end{aligned} \quad (5.51b)$$

Волновые векторы протона и пиона мы снабдили дополнительными индексами  $p$  и  $\pi$  соответственно. Матричные элементы (5.51a) и (5.51b) физически различны; в матричном элементе (5.51a) слева стоит состояние, описывающее протон с волновым вектором  $k''$  и пион с волновым вектором  $k^{IV}$ , в то время как в матричном элементе (5.51b) слева стоит состояние, описывающее протон с волновым вектором  $k^{IV}$  и пион с волновым вектором  $k''$ . Эти два состояния [стоящие слева в матричных элементах (5.51)] переходят друг в друга при замене протона на пион. Поскольку протон и пион — это разные, т. е. *различимые*, частицы, то эти два состояния физически различны и обладают разными свойствами.

Рассмотрим теперь случай, когда две частицы тождественны, т. е. случай системы, состоящей из двух пионов или двух протонов. Для обоих интегралов (5.51a) и (5.51b) можно считать, что в них входят совершенно произвольные четверки волновых векторов  $k'$ ,  $k''$ ,  $k'''$ ,  $k^{IV}$ . Конечно, оба эти интеграла имеют разные значения для этих четверок векторов. Однако если частицы тождественны,

то оба наши интеграла описывают матричные элементы между совершенно одинаковыми, т. е. *неразличимыми*, состояниями двух-частичной системы <sup>1)</sup>. Поэтому здесь возникает вопрос: как надо скомбинировать два матричных элемента (5.51), чтобы учесть неразличимость частиц?

Чтобы ответить на этот вопрос, запишем наш оператор в формализме вторичного квантования аналогично тому, как мы записывали одночастичные операторы:

$$V \rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\substack{k'k'' \\ k''k^{IV}}} \langle k^{IV} k''' | V | k'' k' \rangle a_{k^{IV}}^\dagger a_{k''}^\dagger a_{k''} a_{k'} \quad (5.52)$$

Каждый операторный член в сумме в правой части (5.52) описывает уничтожение двух частиц, находящихся в некоторых состояниях  $k'$  и  $k''$ , и рождение двух частиц в некоторых состояниях  $k'''$  и  $k^{IV}$ . Появление таких членов в двухчастичном операторе понятно, так как, уничтожая две частицы и рождая две другие, этот оператор как раз изменяет состояния двух частиц. Однако для нашего оператора совершенно неважно, какая именно из двух частиц рождается в состоянии  $k'''$  (та ли, которая первоначально была в состоянии  $k'$ , или та, которая первоначально находилась в состоянии  $k''$ ). Это находится в согласии с *принципом неразличимости тождественных частиц*.

Легко видеть, что в формулу (5.52) для любой заданной четверки значений волновых векторов входят четыре разных операторных члена, каждый из которых описывает уничтожение двух частиц в заданных состояниях  $k'$  и  $k''$  и рождение двух других частиц тоже в заданных состояниях  $k'''$  и  $k^{IV}$ :

$$\langle k^{IV} k''' | V | k'' k' \rangle a_{k^{IV}}^\dagger a_{k''}^\dagger a_{k''} a_{k'}, \quad (5.53a)$$

$$\langle k^{IV} k''' | V | k' k'' \rangle a_{k^{IV}}^\dagger a_{k''}^\dagger a_{k''} a_{k'}, \quad (5.53б)$$

$$\langle k''' k^{IV} | V | k'' k' \rangle a_{k''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger a_{k''} a_{k'}, \quad (5.53в)$$

$$\langle k''' k^{IV} | V | k' k'' \rangle a_{k''}^\dagger a_{k^{IV}}^\dagger a_{k''} a_{k'}. \quad (5.53г)$$

Матричные элементы двухчастичного потенциала в (5.53а) и (5.53в) соответствуют матричным элементам (5.51а) и (5.51б) для случая различимых частиц. Оба эти матричных элемента различны. Поскольку порядок операторов рождения в (5.53а) и (5.53в) различен, то в сумме (5.52) матричные элементы рассматриваемых операторных членов либо складываются, либо вычитаются в зави-

<sup>1)</sup> Автор использует определение (5.18) для состояния  $|k''' k^{IV}|$ , поэтому, строго говоря, он не должен писать формулы (5.51а), (5.51б) для тождественных частиц. — *Прим. перев.*

симости от того, являются ли частицы бозонами или фермионами. То же справедливо и в отношении двух других операторных членов (5.53б) и (5.53г). Можно все это представить в явном виде, если составить сумму вкладов всех четырех операторных членов (5.53) в полную сумму (5.52), изменив предварительно порядок следования операторов рождения и уничтожения для того, чтобы все четыре операторных выражения привести к одному стандартному виду, например к виду (5.53а). При этом в случае фермионов, согласно правилам антикоммутации, нужно изменять знаки при каждой перестановке двух операторов. В результате для суммы вкладов (5.53) получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} & \{ \langle k^{IV} k^m | V | k' k' \rangle + \langle k^m k^{IV} | V | k' k' \rangle \} \pm \{ \langle k^{IV} k^m | V | k' k^m \rangle + \\ & + \langle k^m k^{IV} | V | k' k' \rangle \} a_{k'IV}^\dagger a_{k^m}^\dagger a_{k'} a_{k^m}; \end{aligned} \quad (5.54)$$

знак «плюс» берется для бозонов, а знак «минус» — для фермионов.

Если двухчастичное взаимодействие симметрично относительно перестановки двух частиц, т. е. подобно, например, кулоновскому взаимодействию (5.50), то двухчастичный матричный элемент не меняется при одновременной перестановке квантовых чисел обеих частиц *как* в начальном, *так* и в конечном состояниях. В этом случае первые два слагаемых в (5.54) равны, так же как равны третье и четвертое слагаемые между собой.

Особый интерес представляет случай, когда состояния двух рождающихся частиц совпадают с состояниями двух уничтожаемых. Рассмотрим, например, случай, когда  $k^m = k'$  и  $k^{IV} = k'$ . При этом для *различимых* частиц, например протона и пиона, в формуле (5.51а) появляется диагональный матричный элемент, а в формуле (5.51б) — недиагональный, причем в них слева и справа стоят одни и те же плоские волны, но протон и пион переставлены местами. В состоянии, стоящем в матричном элементе справа, пион находится в состоянии  $k'$ , а протон — в состоянии  $k^m$ ; в состоянии, стоящем в (5.51б) слева, — наоборот. В случае *неразличимых* частиц диагональны оба матричных элемента, так как перестановки неразличимых частиц не меняют двухчастичного состояния. Следовательно, диагональные матричные элементы двухчастичного оператора в случае неразличимых частиц равны либо суммам, либо разностям пар соответствующих матричных элементов для различных частиц, причем сумме они равны в случае бозонов, а разности — в случае фермионов. Член в формуле (5.54), который соответствует операторному члену (5.51а), имеющему диагональный вид также и в случае различных частиц, часто называют «прямым», а член в формуле (5.54), который соответствует операторному члену (5.51б), связанному с перестановкой

различных частиц, часто называют «обменным». Из коммутационных и антикоммутационных соотношений ясно, что знак перед обменным членом в (5.54) положительный для бозонов и отрицательный для фермионов.

В шредингеровском представлении обменные члены появляются по той причине, что в этом представлении используются симметричные или антисимметричные волновые функции. В формализме вторичного квантования обменные члены появляются сами собой, автоматически, причем с правильными знаками, непосредственно получаемыми из коммутационных и антикоммутационных соотношений. Вообще в этом формализме все эффекты, связанные с учетом статистики Бозе или статистики Ферми (т. е. принципа Паули) заложены уже в самих коммутационных и антикоммутационных соотношениях (5.25).

### § 7. Спин и другие степени свободы. Частицы различных типов

Спин и другие внутренние степени свободы частицы легко включить в теорию, которой мы сейчас занимаемся. Рассмотрим, например, частицу со спином  $s$ . Проекция спина на некоторую ось характеризуется квантовым числом, принимающим  $2s + 1$  значений. Соответственно можно ввести полный набор вторично квантованных операторов рождения  $a_{k\sigma}^{\dagger}$ , рождающих частицы в состояниях, описываемых плоскими волнами с волновым вектором  $k$  и спином  $\sigma$ . Коммутационные и антикоммутационные соотношения (5.25) остаются справедливыми для операторов рождения и уничтожения с дополнительным спиновым индексом  $\sigma$ ; только в формуле (5.25б) появится еще один  $\delta$ -символ, обеспечивающий совпадение проекций спинов для состояний, у которых уже совпадают волновые числа.

Обобщение теории на случай учета других внутренних степеней свободы, таких, как изоспин, проводится тоже легко. Квантовые многочастичные системы, составленные из нейтронов и протонов, можно описать с помощью нуклонных операторов рождения и уничтожения  $a_{k\sigma\tau}^{\dagger}$  и  $a_{k\sigma\tau}$  в состояниях с волновым вектором  $k$ , спином  $\sigma$  и зарядом  $\tau$ . Заряд  $\tau$  принимает два значения: одно соответствует нейтрону, а другое — протону.

Рассмотрим теперь квантовую многочастичную систему, включающую тождественные частицы *разных типов*, например систему, составленную из атомов водорода (содержащую электроны и протоны). И электроны, и протоны являются фермионами, и их можно описать своими наборами операторов рождения и уничтожения, причем эти операторы должны удовлетворять (по отдельности) фермионным антикоммутационным соотношениям. Но каки-

ми должны быть коммутационные соотношения между протонными и электронными операторами рождения и уничтожения, должны ли они коммутировать или антикоммутировать? С одной стороны, поскольку электроны и протоны — совершенно различные частицы, то можно подумать, что их операторы будут коммутировать друг с другом, как коммутируют между собой операторы в шредингеровском представлении, относящиеся к независимым степеням свободы. С другой стороны, поскольку и протоны, и электроны являются фермионами, можно ожидать, что их операторы будут антикоммутировать друг с другом, как антикоммутируют между собой разные фермионные операторы. Ведь именно так обстоит дело с протонными и нейтронными операторами рождения и уничтожения, когда мы ввели изоспиновый индекс  $\tau$  для их различия.

Чтобы решить эту проблему, необходимо внимательно разоб- рать, чем с физической точки зрения отличаются следующие утверждения: «две частицы полностью различных типов» и «два различных состояния одной и той же частицы». В квантовой механике из двух состояний одной частицы всегда можно образовать линейную комбинацию, причем *разности фаз* состояний, входящих в любую такую комбинацию, можно измерить в соответствующем квантовом интерференционном эксперименте. Для электрона и протона разности фаз их состояний в линейной комбинации, однако, принципиально не могут быть измерены и говорить о них не имеет никакого физического смысла. Частица может быть *либо электроном, либо протоном*. Она не может быть когерентной суперпозицией двух этих частиц, такой, чтобы для этой суперпозиции разности фаз составляющих состояний можно было бы физически измерить. Говорят в таких случаях, что существует «правило суперотбора», запрещающее комбинировать состояния, в которых электрический заряд имеет различные значения. Все сказанное можно, конечно, применить к нейтрону и протону: для них тоже есть правило суперотбора. Здесь мы начинаем понимать важную физическую разницу между «изоспином» и «обычным спином».

Какие же на самом деле — коммутационные, или антикомму- тационные — соотношения следует использовать для операторов частиц различных типов, можно установить, рассматривая, как изменяются правила коммутации и антикоммутации при изменении базиса одночастичных состояний. Если мы примем допущение, что электронные операторы *коммутируют* с протонными операторами, хотя электронные и протонные операторы антикоммутируют между собой по отдельности, то у нас сразу возникнут затруднения при переходе к новому набору базисных состояний, которые представляют собой линейные комбинации электронных и протонных одночастичных состояний. Коммутационные и анти-

коммутационные соотношения в новом базисе будут очень сложными и будут существенно отличаться по виду от соотношений (5.25). Правда, для электронов и протонов эта трудность чисто формальная, так как одночастичные состояния, представляющие собой линейные комбинации состояний электрона и протона, не имеют физического смысла. Не имеют никакого физического смысла разности фаз векторов электронного и протонного состояний. Если же принять, что для протонных и электронных операторов справедливы *антикоммутационные* соотношения, то не возникнет даже и формальных трудностей, когда мы захотим рассмотреть нефизичные линейные комбинации состояний электрона и протона.

Различие между спином и изоспином состоит, таким образом, в следующем. Нейтроны и протоны можно рассматривать либо как частицы двух разных типов, либо как два состояния одной частицы — нуклона. Что касается электронов, то их тоже можно было бы считать частицами двух разных типов: со спином, направленным «вверх», и со спином, направленным «вниз». Пока мы рассматриваем только силы, действующие между электронами и не зависящие от спинов, нам совершенно безразлично, считаются ли электроны тождественными частицами или электроны «со спином вверх» принципиально отличаются от электронов «со спином вниз». При учете сил между электронами, зависящих от спинов, представление об электронах как о различных частицах оказывается неверным, поскольку в этом случае необходимо рассматривать не только электроны, спины которых ориентированы только вверх или только вниз, но также и электроны, спины которых ориентированы и в других направлениях, т. е. возникает необходимость рассматривать *линейные комбинации* состояний со спином вверх и вниз. Формально это связано с тем, что существуют физические динамические величины, которые не коммутируют с  $z$ -компонентой спина. Экспериментально измеримых физических величин, операторы которых не коммутировали бы с электрическим зарядом или  $z$ -компонентой изоспина, в природе не существует. Что касается изоспиновых операторов  $\tau_x$  и  $\tau_y$ , то это чисто формальные операторы, удобные для вычислений, но не соответствующие никаким наблюдаемым физическим величинам.

Если фермионы двух типов *действительно* различны в том смысле, что *когерентные линейные комбинации* состояний этих фермионов никакого физического смысла не имеют, то вторично квантованные операторы рождения и уничтожения этих частиц можно, по желанию, считать коммутирующими или антикоммутирующими. Если остановить свой выбор на одной из этих возможностей и эксплуатировать ее последовательно, то полученные физические результаты не будут, конечно, зависеть от того, взяли ли мы коммутационные или антикоммутационные соотношения.

Формальные различия могут проявиться только в ненаблюдаемых фазовых множителях, стоящих при векторах состояний.

В квантовых многочастичных системах, составленных из частиц различных типов, среди которых есть бозоны, последние не приводят к неопределенностям. Это связано с тем, что бозонные операторы рождения и уничтожения коммутируют с любыми другими вторично квантованными операторами рождения и уничтожения.

Теперь мы можем обобщить формулу (5.17), потребовав, чтобы двухчастичные состояния были пространственно симметричны для бозонов и антисимметричны для фермионов. Это позволяет нам построить двухчастичные состояния, аналогичные (5.17), для частиц, обладающих спином:

$$\begin{aligned} \sum_{q, \sigma', \sigma''} g(\mathbf{q}) h(\sigma', \sigma'') a_{\mathbf{k}-q, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}+q, \sigma''}^\dagger = \\ = \pm \sum_{q, \sigma', \sigma''} g(-\mathbf{q}) h(\sigma'', \sigma') a_{\mathbf{k}-q, \sigma'}^\dagger a_{\mathbf{k}+q, \sigma''}^\dagger. \end{aligned} \quad (5.55)$$

Здесь функция  $h(\sigma', \sigma'')$  описывает спиновые состояния двух частиц в рассматриваемом волновом пакете, а выражение в правой части формулы (5.55) получается из выражения в левой части перестановкой друг с другом операторов рождения, изменением знака  $\mathbf{q}$  и переобозначением индексов суммирования  $\sigma'$  и  $\sigma''$ . Из формулы (5.55) следует, что для бозонов  $g(\mathbf{q})$  будет четной функцией, если  $h$  — симметричная функция относительно перестановки спиновых переменных, и нечетной функцией, если  $h$  будет антисимметричной функцией. Для фермионов, наоборот, получаем, что  $g(\mathbf{q})$  — нечетная функция при симметричной функции  $h$  и четная функция при антисимметричной функции  $h$ .

Полученные соотношения очень просто понять, если рассмотреть квантовые числа полного спинового и орбитального моментов количества движения. Для бозонов функция  $h(\sigma', \sigma'')$  симметрична при четном полном спине двухчастичного состояния и антисимметрична при нечетном полном спине, а для фермионов функция  $h(\sigma', \sigma'')$ , наоборот, антисимметрична при четном полном спине и симметрична при нечетном полном спине. Это правило легко запомнить следующим образом. Нужно просто твердо знать, что при любом значении спина  $s$  одной частицы двухчастичное состояние с *максимальным* спином  $2s$  всегда симметрично и, далее, что  $2s$  четно для бозонов (частиц, имеющих целый спин) и нечетно для фермионов (частиц, имеющих полуцелый спин). Таким образом, как в случае бозонов, так и в случае фермионов функция  $g(\mathbf{q})$  является четной функцией при четном полном спине двухчастичного состояния и нечетной функцией при нечетном полном спине. При четном полном спине внутренняя четность системы двух тожд-



дественных частиц, следовательно, положительна, а квантовое число ее орбитального момента количества движения имеет четное значение; при нечетном полном спине четность такой системы отрицательна, а квантовое число орбитального момента количества движения нечетно независимо от того, состоит ли наша система из двух бозонов или из двух фермионов.

Аналогичные рассуждения можно провести и в отношении других степеней свободы, например изоспина, но следует помнить (хотя это и довольно странно), что бозоны почему-то всегда имеют целый изоспин, а фермионы — полупечный изоспин.

### § 8. Условное вакуумное состояние

Вакуумное состояние определяется как состояние, вообще не содержащее ни одной частицы. Оно, следовательно, удовлетворяет соотношениям (5.21а) при всех значениях  $k'$ . Однако в большинстве физических приложений формализма вторичного квантования нас практически никогда не интересует состояние, удовлетворяющее соотношениям (5.21а) при *всех* возможных значениях  $k'$ . В самом деле, пусть, например, мы на Земле изучаем три электрона в каком-то атоме лития, а на Луне в этот момент имеются еще какие-то другие электроны. Конечно, электроны, находящиеся на Луне, нас не интересуют, так как мы знаем, что их влиянием на атом лития, находящийся на Земле, можно пренебречь. Тем не менее в представлении Шредингера волновые функции электронов необходимо антисимметризовать относительно всех электронов, имеющих в природе. В то же время, если не считаться с гипотетической возможностью существования особо дальнедействующих взаимодействий, то электроны, находящиеся на Луне, можно не рассматривать, так как их движение не может повлиять на движение электронов в атоме лития на Земле. В формализме вторичного квантования «проблема частиц на Луне» решается очень просто. Нужно по-новому определить «вакуумное состояние»: это состояние, удовлетворяющее соотношениям (5.21а) не для *всех* операторов, а только для операторов, описывающих частицы, находящиеся на Земле. Нас вообще не должно интересовать, каким оно удовлетворяет соотношениям для операторов, рождающих частицы на Луне. Вакуумное состояние, следовательно, оказывается определенным неоднозначно, т. е. оно может быть каким угодно состоянием по отношению к частицам, находящимся на Луне. Но это неважно. Вакуумное состояние, определенное таким образом, оказывается вполне достаточным для нас, так как мы можем с его помощью однозначно предсказывать абсолютно все, что связано с наблюдаемыми физическими частицами на Земле. Все нужные нам величины можно выразить [аналогично тому,

как это было сделано в формуле (5.42)] через средние по нашему вакуумному состоянию от произведений операторов рождения и уничтожения частиц на Земле. Эти вакуумные средние совершенно однозначны, если только наше вакуумное состояние действительно удовлетворяет соотношениям (5.21а) для всех операторов рождения частиц на Земле, т. е. средние никак не зависят от того, как мы вообще описываем частицы, находящиеся на Луне.

Введенное нами понятие «условного вакуума», т. е. состояния, удовлетворяющего соотношениям (5.21а) *только* для операторов рождения частиц в таких квантовых состояниях, которые непосредственно относятся к рассматриваемой задаче, можно обобщить еще больше. Так, например, во многих задачах атомной и ядерной физики нужно рассматривать квантовые системы, состоящие из частиц, находящихся на инертных заполненных оболочках атомного или ядерного «остова», и нескольких внешних так называемых «валентных» частиц, находящихся на какой-нибудь незаполненной оболочке. Все представляющие интерес свойства таких многочастичных систем определяются исключительно валентными частицами. Поэтому в задачах указанного типа можно ввести вакуумное состояние, удовлетворяющее соотношениям (5.21а) только для состояний частиц данной незаполненной (валентной) оболочки. В противоположность разобранному выше случаю, когда мы отбрасывали частицы, находящиеся на Луне (мы вообще не интересовались состояниями этих частиц), в случае указанных квантовых многочастичных систем вакуумное состояние определяется совершенно однозначно, а именно как такое состояние, в котором все одночастичные состояния заполненных оболочек заполнены частицами. Вакуумное состояние, определенное таким образом, позволяет нам легко учесть некоторые эффекты, связанные с частицами заполненных оболочек (например эффект экранирования кулоновского потенциала атомного ядра электронами заполненных оболочек или эффект усредненного взаимодействия притяжения нуклонов заполненных оболочек в ядре и валентных нуклонов). Более подробно этими вопросами мы займемся в гл. 9.

Отметим, что вакуумное состояние, используемое в случае атома или ядра с заполненными оболочками, *качественно отличается* от вакуумного состояния, используемого в ситуации, когда мы интересовались частицами на Земле и пренебрегали влиянием на них частиц на Луне. Действительно, добавление к нашей системе на Земле новых частиц практически не может повлиять на движение частиц на Луне. Напротив, при добавлении валентных частиц к атому или ядру с заполненными оболочками предположение о том, что это не будет влиять на инертный остов, — только приближение. Добавление валентных частиц к атому или ядру может вызвать заметную поляризацию атомного или ядер-

ного остова. Когда состояние остова с заполненными оболочками описывается как вакуумное состояние, подобные поляризационные эффекты называют *вакуумной поляризацией*.

Квантовомеханическая система, составленная из небольшого числа частиц, находящихся на Земле, и большого числа частиц, находящихся на Луне, обладает огромным числом степеней свободы, из которых только небольшое число имеет отношение к рассматриваемым физическим явлениям. Несущественные степени свободы мы исключили из рассмотрения, выбрав соответствующим образом «условное вакуумное состояние». Многоэлектронный атом или многонуклонное ядро также представляют собой многочастичную квантовую систему, обладающую большим числом степеней свободы, из которых значительное число (а именно степени свободы частиц в заполненных оболочках) практически не существенно для физических явлений, которыми мы интересуемся. Исключение дополнительных степеней свободы из рассмотрения путем включения их в вакуумное состояние — это, разумеется, наше приближение. В более высоких приближениях степени свободы частиц в заполненных оболочках необходимо будет учитывать; они проявляются в поляризации вакуумного состояния, а также в его возбуждениях. Конечно, наше исходное приближение окажется полезным, если только, разумеется, эффекты «поляризации» и «возбуждения» будет проще описывать с его помощью, чем в рамках строгого подхода, в котором все степени свободы рассматриваются на равных основаниях. Подробнее эти эффекты обсуждаются в гл. 10 и 11. В квантовой теории поля всегда приходится рассматривать системы, которые имеют бесконечное число степеней свободы, и поэтому вакуумное состояние в ней необходимо понимать в том смысле, как мы его понимали для атомов и ядер с заполненными оболочками. При этом эффекты поляризации и возбуждения вакуумного состояния составляют важную неотъемлемую часть квантовой теории поля и наблюдаются экспериментально.

### Задачи

1. Выпишите в формализме вторичного квантования гамильтониан частицы, движущейся во внешнем электромагнитном поле.
2. Вычислите матричные элементы  $\langle k'k'' | A | k''k'' \rangle$  одночастичного оператора  $A$ , предположив, что волновые числа принимают любые значения.
3. Две тождественные частицы массы  $m$  движутся, взаимодействуя друг с другом посредством гармонического потенциала  $\frac{1}{2}\omega^2 |r_1 - r_2|^2$ . Рассмотрите движение в одном измерении, а затем и трехмерный случай.

а) Выпишите в формализме вторичного квантования вектор состояния для состояния, обладающего полным импульсом  $2\hbar k$  и наименьшей энергией 1) в случае бозонов, 2) в случае фермионов.

б) Постройте операторы рождения и уничтожения  $n$  квантов гармонического осциллятора для относительного движения двух частиц. Выпишите общее выражение для произвольного вектора состояния, взятого из полного набора стационарных состояний такой двухчастичной системы. Представьте этот вектор состояния как результат действия построенных вами операторов рождения на вектор состояния из задачи 3а.

4. Вычислите следующие вакуумные средние для произведений фермионных операторов:

$$\langle 0 | a_j a_k^\dagger a_m^\dagger a_j^\dagger | 0 \rangle, \quad \langle 0 | a_j a_k a_m^\dagger a_j^\dagger | 0 \rangle.$$

Учтите то, что возможны совпадения индексов  $k = m$ ,  $j = k$  или  $j = m$ .

5. Укажите примеры одночастичного и двухчастичного операторов в шредингеровском представлении. Запишите эти операторы во вторично квантованном виде, выразив их через операторы рождения и уничтожения  $a_k^\dagger$  и  $a_k$  одночастичных состояний, описываемых плоскими волнами.

6. Получите в формализме вторичного квантования выражение для оператора полного числа частиц системы и выразите этот оператор через операторы рождения и уничтожения частиц из задачи 5. Собственные значения оператора полного числа частиц дают полное число частиц в состояниях многочастичной системы. Какие из приведенных ниже состояний являются собственными для оператора полного числа частиц:

- а)  $a_k^\dagger a_m^\dagger a_n^\dagger | 0 \rangle,$   
 б)  $(a_k^\dagger + a_m^\dagger a_n^\dagger) | 0 \rangle,$   
 в)  $\prod_k (u_k + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) | 0 \rangle,$   
 г)  $(\sum_k v_k a_k^\dagger a_{-k}^\dagger)^n | 0 \rangle ?$

Найдите соответствующие собственные значения.

7. Рассмотрите систему из двух электронов атома гелия, считая кулоновское взаимодействие между электронами возмущением. Одно из возможных возбужденных состояний невозмущенной системы следующее: один электрон находится на нижнем одноэлектронном уровне  $1s$ , а второй — на первом возбужденном уровне  $2s$ . Оба уровня имеют нулевые моменты количества движения.

Обозначьте через  $a_{1+}^{\dagger}$ ,  $a_{1-}^{\dagger}$ ,  $a_{2+}^{\dagger}$ ,  $a_{2-}^{\dagger}$  операторы рождения электронов в состояниях на уровнях  $1s$  и  $2s$  (соответственно со спинами, ориентированными «параллельно» и «антипараллельно» положительному направлению оси  $z$ ).

а) В формализме вторичного квантования выпишите векторы состояний для состояний *невозмущенного* атома гелия (т. е. в пренебрежении кулоновским взаимодействием электронов), когда один электрон находится на уровне  $1s$ , а второй — на уровне  $2s$ . Учтите при этом все возможные ориентации спина.

б) Кулоновское взаимодействие между электронами представляется некоторым двухчастичным оператором, *не зависящим* от спинов электронов. Выпишите все не обращающиеся в нуль матричные элементы этого оператора, берущиеся между состояниями, найденными в п. «а».

в) Найдите линейные комбинации состояний из п. «а», которые являются приближенными собственными состояниями гамильтониана в нулевом порядке теории возмущений в случае вырождения. Укажите, какие из этих состояний останутся вырожденными и после включения взаимодействия и какое из них будет иметь наименьшую энергию.

8. Обозначьте через  $a_{pk\sigma}^{\dagger}$  и  $a_{nk\sigma}^{\dagger}$  операторы рождения протонов и нейтронов в однонуклонных состояниях с волновым вектором  $k$  и проекцией спина на ось  $z$ , равной  $\sigma$ .

а) Какие из приведенных ниже состояний являются собственными для оператора полного спина или оператора полного изоспина:

$$\begin{aligned} & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{pk'\downarrow}^{\dagger} a_{nk''\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ & \{a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} - a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{nk'\uparrow}^{\dagger}\} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ & \{a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\downarrow}^{\dagger} + a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk'\downarrow}^{\dagger}\} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{pk'\downarrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{pk'\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{pk'\downarrow}^{\dagger} a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\downarrow}^{\dagger} a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{pk'\downarrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\downarrow}^{\dagger} a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\downarrow}^{\dagger} |0\rangle? \end{aligned}$$

Найдите соответствующие собственные значения. Предположите, что  $k' \neq k''$ ,  $k' \neq k'''$ ,  $k'' \neq k'''$ .

б) Какие из приведенных ниже состояний являются собственными для оператора четности:

$$\begin{aligned} & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{n,-k'\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{p,-k'\uparrow}^{\dagger} a_{nk''\downarrow}^{\dagger} a_{n,-k''\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \\ & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{p,-k'\uparrow}^{\dagger} |0\rangle, & a_{pk'\uparrow}^{\dagger} a_{n,-k'\uparrow}^{\dagger} a_{pk''\uparrow}^{\dagger} a_{p,-k''\uparrow}^{\dagger} |0\rangle? \end{aligned}$$

Найдите соответствующие собственные значения.

## Глава 6. ТОЖДЕСТВЕННЫЕ КОМПОЗИТНЫЕ ЧАСТИЦЫ И СВЯЗАННЫЕ СИСТЕМЫ

### § 1. Введение. Использование формализма вторичного квантования

Во многих физических задачах приходится рассматривать системы из большого числа тождественных композитных частиц — атомов, молекул, ядер, т. е. частиц, которые сами не являются элементарными, а, как известно, представляют собой довольно сложные связанные квантовые системы, состоящие из некоторого числа фермионов, находящихся в связанном состоянии. Внутреннее строение композитных частиц не играет абсолютно никакой роли, *если только мы интересуемся процессами, в которых они выступают как неделимые образования и не разрушаются*. Тогда нужно просто считать, что тождественные композитные частицы неразличимы, например, нельзя отличить один дейтрон от другого. Для систем из композитных частиц можно использовать рассуждения, применявшиеся для систем из элементарных частиц, в частности метод математического описания системы дейтронов, в котором отдельные дейтроны не нумеруются. Следует формально строго определить операторы рождения и уничтожения для отдельных дейтронов, изучить их коммутационные соотношения и прийти к заключению, являются ли дейтроны фермионами или бозонами.

Эксперименты показывают, что квантовые системы, составленные из композитных частиц, действительно правильно описываются в рамках квантовой механики, развитой для тождественных частиц, и что эти частицы всегда можно считать либо бозонами, либо фермионами. В тех экспериментах, в которых композитные частицы выступают как неделимые образования, их внутреннее строение никак не влияет на динамику системы частиц в целом, хотя оно и определяет тип статистики этой многочастичной системы (т. е. определяет, являются ли композитные частицы бозонами или фермионами). Атомы или ядра, содержащие по *четному* числу протонов, нейтронов или электронов, являются *бозонами*, а содержащие по *нечетному* числу — *фермионами*.

Дейтрон — не элементарная частица, а связанное состояние двух элементарных частиц, являющихся фермионами. Мы поэтому не имеем права по собственному усмотрению вводить для отдельных дейтронов операторы рождения и уничтожения и требовать, чтобы для них выполнялись бозонные или фермионные коммута-

ционные соотношения. Все квантовые состояния системы из дейтронов — это фактически состояния очень сложной системы из нейтронов и протонов, и их надо обязательно описывать с помощью уже введенных нами в предыдущей главе не зависящих друг от друга операторов рождения и уничтожения нейтронов и протонов. Поскольку при введении таких операторов в формализме вторичного квантования неразличимость отдельных нейтронов между собой и отдельных протонов между собой была уже учтена, то это автоматически обеспечивает учет неразличимости дейтронов, состоящих из нейтронов и протонов. Следовательно, результаты всех экспериментов, в которых должен проявиться тип квантовой статистики композитных частиц, можно предсказать, если описывать композитные частицы при помощи операторов рождения и уничтожения, относящихся к составляющим их элементарным частицам.

Остановимся теперь подробнее на описании в рамках формализма вторичного квантования сложной системы, состоящей из композитных частиц. Рассмотрим прежде всего самую простую композитную частицу, состоящую из двух элементарных частиц, находящихся в связанном состоянии, например дейтрон с полным импульсом  $2\hbar K$ . Обозначим соответствующий вектор состояния композитной частицы  $|D; \uparrow 2K\rangle$ . Шредингеровская волновая функция, описывающая эту двухчастичную связанную систему, является функцией координат  $r_1$  и  $r_2$  обеих элементарных частиц, и ее удобнее всего записать как произведение функции координаты центра масс  $R$  и функции относительной координаты  $r$ :

$$\langle R, r | D, 2K \rangle = e^{2iK \cdot R} \phi(r). \quad (6.1)$$

Функция  $\phi(r)$  описывает относительное движение обеих частиц в рассматриваемой связанной системе. Ее можно разложить по плоским волнам. Мы будем считать, что наша связанная система из двух частиц заключена в очень большой ящик в форме куба, имеющий конечный объем, и будем пользоваться обычными периодическими граничными условиями, налагаемыми на волновые функции на границах этого куба. Разложение по плоским волнам будет тогда суммой, а не интегралом:

$$\langle R, r | D, 2K \rangle = e^{2iK \cdot R} \sum_q g_q e^{iq \cdot r}, \quad (6.2a)$$

$$\langle R, r | D, 2K \rangle = \sum_q g_q e^{i(K+q) \cdot r_1} e^{i(K-q) \cdot r_2}, \quad (6.2b)$$

$$\sum_q |g_q|^2 = 1, \quad (6.2v)$$

где  $g_q$  — фурье-образ функции  $\phi(r)$ . Исходя из (6.2), запишем «дейтронный» вектор состояния в формализме вторичного кванто-

вания в следующем виде:

$$|D, 2K\rangle \rightarrow \sum_q g_q a_{K+q}^\dagger a_{K-q}^\dagger |0\rangle. \quad (6.3)$$

Вектор состояния (6.3) описывает систему из двух *тождественных* частиц, находящуюся в связанном состоянии, которое характеризуется шредингеровской волновой функцией  $\phi(r)$ . В дейтроне, однако, две составляющие его элементарные частицы *не тождественны*; одна из них — нейтрон, а другая — протон. Нам необходимо поэтому воспользоваться изотопическим формализмом и рассмотреть «нуклонные» операторы  $a_{m\uparrow}^\dagger$  и  $a_{m\downarrow}^\dagger$ , рождающие соответственно протоны и нейтроны (изоспин направлен «вверх» или «вниз») в одночастичном состоянии  $m$ . Будем считать, что эти операторы рождения протонов и нейтронов антикоммутируют друг с другом. Обычным спином протона и нейтрона будем пренебрегать. Тогда можно определить следующий «дейтронный» оператор рождения:

$$D_{2K}^\dagger \equiv \sum_q g_q a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{K-q, \downarrow}^\dagger; \quad (6.4a)$$

используя его, имеем

$$|D, 2K\rangle = D_{2K}^\dagger |0\rangle. \quad (6.4b)$$

Соответствующий «дейтронный» оператор уничтожения получим, взяв эрмитово сопряжение от (6.4a), что даст

$$D_{2K} = \sum_q g_q a_{K-q, \downarrow} a_{K+q, \uparrow}. \quad (6.5)$$

Коэффициенты  $g_q$  мы ради простоты считаем действительными. (Конечно, можно без труда обобщить наше рассмотрение на случай комплексных  $g$ , просто поставив кое-где звездочки при соответствующих величинах.)

Чтобы посмотреть, являются ли дейтроны *бозонами*, надо составить коммутационные соотношения построенных «дейтронных» операторов рождения и уничтожения. Сначала мы, однако, рассмотрим коммутационные соотношения нуклонных операторов рождения и уничтожения с дейтронными операторами рождения и уничтожения (6.4a), (6.5). Непосредственно применяя коммутационные и антикоммутационные соотношения (5.25), получаем

$$\begin{aligned} [a_{m\uparrow}, D_{2K}^\dagger] &= \sum_q g_q \{a_{m\uparrow} a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{K-q, \downarrow}^\dagger - a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{K-q, \downarrow}^\dagger a_{m\uparrow}\} = \\ &= \sum_q g_q \{a_{m\uparrow} a_{K+q, \uparrow}^\dagger + a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{m\uparrow}\} a_{K-q, \downarrow}^\dagger = \\ &= \sum_q g_q \delta_{m, K+q} a_{K-q, \downarrow}^\dagger = g_{m-K} a_{2K-m, \downarrow}^\dagger \end{aligned} \quad (6.6a)$$



и аналогично

$$[a_{m\downarrow}, D_{2k}^\dagger] = -g_{k-m} a_{2k-m, \uparrow}^\dagger, \quad (6.6б)$$

$$[a_{m\uparrow}^\dagger, D_{2k}] = -g_{m-k} a_{2k-m, \downarrow}, \quad (6.6в)$$

$$[a_{m\downarrow}^\dagger, D_{2k}] = g_{k-m} a_{2k-m, \uparrow}, \quad (6.6г)$$

$$[a_{m\downarrow}^\dagger, D_{2k}^\dagger] = [a_{m\downarrow}, D_{2k}] = [a_{m\uparrow}^\dagger, D_{2k}^\dagger] = [a_{m\uparrow}, D_{2k}] = 0. \quad (6.6д)$$

Коммутационные соотношения (6.6), конечно, вовсе не имеют такого вида, какой можно было бы ожидать для коммутационных соотношений нуклонных операторов рождения и уничтожения с дейтронными операторами рождения и уничтожения, если бы нуклоны и дейтроны были бы частицами совершенно разных типов, а дейтроны — истинными бозонами. Тогда все коммутаторы соотношения (6.6), конечно, должны были бы обратиться в нуль. Из (6.6), однако, мы видим, что некоторые из коммутаторов не нули, а пропорциональны нуклонным операторам рождения и уничтожения с коэффициентами пропорциональности, которые оказываются коэффициентами  $g_q$  в разложении Фурье (6.2а). Появление не обращающихся в нуль коммутаторов свидетельствует о том, что дейтроны действительно представляют собой композитные частицы, построенные из нуклонов. Во всех тех физических задачах, в которых сложная структура дейтрона не играет роли, следует ожидать, что правые части рассматриваемых коммутаторов пренебрежимо малы.

Действительно, коммутаторы (6.6) очень малы. Размеры ящика, в котором заключен дейтрон, очень велики по сравнению с собственными размерами дейтрона, поэтому требуется огромное число плоских волн, чтобы построить волновую функцию дейтрона. Следовательно, с одной стороны, каждый коэффициент  $g_q$  в разложении (6.2а) будет очень мал из-за необходимости удовлетворить условию нормировки (6.2в). С другой стороны, матричные элементы входящих в правые части (6.6) нуклонных операторов рождения и уничтожения вследствие действия принципа Паули всегда порядка единицы. Поэтому все коммутаторы (6.6) в рассматриваемом случае очень малы и ими, действительно, можно пренебречь.

Однако все приведенные выше рассуждения не проходят, если наш ящик содержит так много дейтронов, что значительное число нуклонных состояний оказывается занятым. Свободные нуклоны в силу принципа Паули не могут занимать этих уже занятых дейтронами нуклонных состояний, и, следовательно, движение всей системы, составленной из свободных нуклонов и дейтронов, существенно изменится, так как сами дейтроны построены из нейтронов и протонов. Чтобы проследить, как происходят эти изменения,

рассмотрим состояние, в котором имеется  $N$  дейтронов:

$$(D_{2K}^\dagger)^N |0\rangle. \quad (6.7)$$

Используя (6.6а), вычислим коммутатор

$$[a_{m\uparrow}, (D_{2K}^\dagger)^N] = N g_{m-K} (D_{2K}^\dagger)^{N-1} a_{2K-m, \uparrow}^\dagger. \quad (6.8)$$

Этот коммутатор будет мал только в том случае, если будет мало произведение  $N g_{m-K}$ . Следовательно, если  $N$  мало, то коммутатором (6.8) по-прежнему можно пренебречь. Однако, когда  $N$  становится большим (т. е. когда число дейтронов в ящике оказывается сравнимым с числом плоских волн, которые необходимо взять, чтобы построить волновую функцию отдельного дейтрона), ситуация меняется и нуклоны, и дейтроны уже нельзя больше считать независимыми частицами различных типов.

Рассчитаем теперь коммутаторы дейтронных операторов рождения и уничтожения друг с другом. Используя (6.6а) и (6.6б), получаем

$$[D_{2K}, D_{2K'}] = [D_{2K}^\dagger, D_{2K'}^\dagger] = 0, \quad (6.9a)$$

$$\begin{aligned} [D_{2K'}, D_{2K}^\dagger] &= \sum_q g_q \{a_{K'-q, \downarrow} [a_{K'+q, \uparrow}, D_{2K}^\dagger] + \\ &+ [a_{K'-q, \downarrow}, D_{2K}^\dagger] a_{K'+q, \uparrow}\} = \\ &= \sum_q g_q \{g_{K'-K+q} a_{K'-q, \downarrow} a_{2K-K'-q, \downarrow}^\dagger - \\ &- g_{K'-K-q} a_{2K-K'+q, \uparrow}^\dagger a_{K'+q, \uparrow}\} = \\ &= \delta_{KK'} - \Delta_{KK'}, \end{aligned} \quad (6.9б)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{KK'} &= \sum_q g_q \{g_{K'-K+q} a_{2K-K'-q, \downarrow}^\dagger a_{K'-q, \downarrow} + \\ &+ g_{K'-K-q} a_{2K-K'+q, \uparrow}^\dagger a_{K'+q, \uparrow}\}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Коммутаторы (6.9) будут в точности коммутаторами для истинных бозонных операторов рождения и уничтожения, если только можно пренебречь величинами  $\Delta_{KK'}$  в (6.9б). Поскольку операторные величины  $\Delta_{KK'}$  пропорциональны малым величинам  $g_q$ , то они малы, т. е. в данном случае можно повторить в точности те же рассуждения, что и в случае коммутаторов (6.6) нуклонных и дейтронных операторов.

Формула (6.10) имеет особенно простой вид при  $K = K'$ ; тогда входящие в нее произведения операторов рождения и уничтожения объединяются в операторы чисел заполнения, даваемые (5.45), и мы получаем

$$\Delta_{KK} = \sum_q g_q^2 (n_{K-q, \downarrow} + n_{K+q, \uparrow}), \quad (6.11a)$$

$$= \sum_q (g_{K-q}^2 n_{q\downarrow} + g_{q-K}^2 n_{q\uparrow}). \quad (6.11b)$$

Формула (6.11) — просто формула для среднего числа нуклонов в состоянии  $q$  (усредненного по всем состояниям  $q$  с нормировочными весовыми множителями  $g_{K-q}^2$  и  $g_{q-K}^2$ ). Таким образом, по порядку величины среднее число нуклонов  $\Delta_{KK}$  равно отношению полного числа нуклонов в системе к числу плоских волн, необходимых для образования дейтронного волнового пакета. Снова мы видим, что различия в коммутационных соотношениях дейтронных и настоящих бозонных операторов малы в тех случаях, когда полное число дейтронов, имеющих в нашей системе, мало по сравнению с числом плоских волн, составляющих волновой пакет.

Предположим теперь, что волновая функция дейтрона выражена через плоские волны, импульсы которых имеют разброс  $\Delta p$ , характеризующий некоторый объем в импульсном пространстве. Полное число состояний, приходящихся тогда на этот объем, просто равно  $(\Delta p)^3 V / \hbar^3$ , где  $V$  — объем ящика, в котором заключена система. С другой стороны, согласно принципу неопределенности, отношение  $\hbar / \Delta p$  по порядку величины равно линейным размерам дейтрона  $\Delta x$ . Следовательно, полное число состояний плоских волн в дейтронном пакете по порядку величины равно отношению объема области пространства, в которой заключен дейтрон, к объему самого дейтрона. Таким образом, из формулы (6.11) непосредственно вытекает, что дейтроны ведут себя как бозоны в тех случаях, когда общий объем, занимаемый дейтронами, мал по сравнению с объемом той области пространства, в которой они движутся (другими словами, в тех случаях, когда расстояние между дейтронами велико по сравнению с размерами одного дейтрона, т. е. когда волновые функции различных дейтронов практически не перекрываются).

Аналогичные рассуждения в отношении квантовых систем из композитных частиц, состоящих из трех или большего числа фермионов, приводят к заключению, что эти квантовые системы ведут себя как системы бозонов или фермионов в зависимости от того, содержит ли одна композитная частица четное или нечетное

число фермионов, и при условии, если *взаимными перекрытиями волновых функций отдельных композитных частиц можно пренебречь*, т. е. если собственные размеры наших композитных частиц малы по сравнению со средними расстояниями между ними.

### § 2. Свойства перекрывающихся фермионных пар

Может возникнуть вопрос: как будет вести себя многочастичная квантовая система, образованная из связанных фермионных пар, например составленная из дейтронов, если плотность частиц в ней будет так высока, что будет наблюдаться *значительное перекрытие* волновых функций различных пар, т. е. если размерами пар уже нельзя будет пренебречь по сравнению с расстояниями между парами? В недавнее время было обнаружено, что такие системы из связанных фермионных пар необходимо рассматривать для объяснения ряда интересных физических явлений. Системами из «перекрывающихся» пар, образованных связанными друг с другом или сильно коррелированными нуклонами, являются, например, сложные атомные ядра; изучение их с рассматриваемой точки зрения очень важно для понимания структуры таких ядерных систем. В металлах тоже могут встретиться системы из перекрывающихся пар, образованных связанными электронами с противоположными спинами, когда эти металлы являются сверхпроводниками.

Некоторые важнейшие физические свойства многочастичных систем из перекрывающихся фермионных пар можно проследить на описываемом ниже примере одной очень упрощенной квантовой системы. Рассмотрим простой дейтронный волновой пакет (6.2), составленный из плоских волн, для которых  $q$  пробегает некоторый конечный интервал значений, причем будем считать, что амплитуды  $g_q$  плоских волн в пакете одинаковы. Другими словами, предположим, что  $g_q$ , т. е. фурье-образ волновой функции  $\phi(\mathbf{r})$ , принимающей действительные значения, имеет вид прямоугольной «ступенчатой» функции распределения по импульсам, как это показано на фиг. 6.1, б. Указанную связанную пару частиц мы будем ниже совершенно условно называть «дейтроном». Результаты, которые мы получим в отношении системы, образованной из таких связанных пар, можно действительно отнести к плотному газу дейтронов. (Впрочем, этот плотный дейтронный газ несколько не интересен с физической точки зрения, так как не встречается в природе. Развиваемая же нами теория совершенно общая и применима к другим, более интересным физическим многочастичным системам, образованным из перекрывающихся фермионных пар, в частности к упомянутым выше системам нуклонов в ядре и электронов в металле, которыми подробно мы еще будем заниматься.)

Обозначим через  $N$  полное число частиц в системе, а через  $\Omega$  — число плоских волн, составляющих дейтронный волновой пакет. Тогда имеем

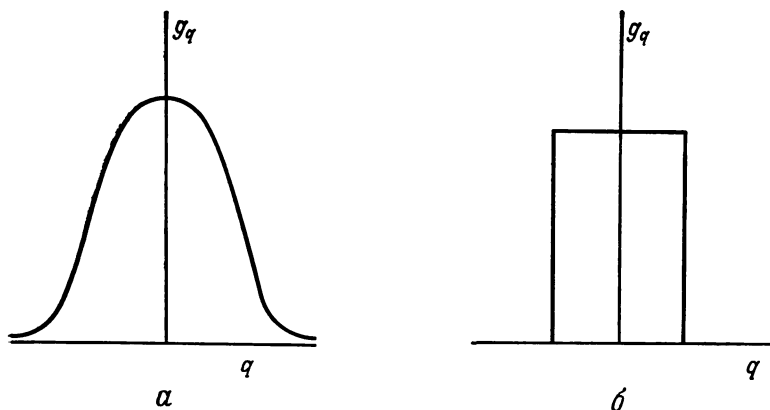
$$N = \sum_q (n_{q\uparrow} + n_{q\downarrow}), \quad (6.12a)$$

$$g_q = \Omega^{-\frac{1}{2}}, \quad (6.12b)$$

причем величина  $\Delta_{KK}$  из (6.11) принимает вид

$$\Delta_{KK} = N/\Omega. \quad (6.13)$$

Простой вид коммутационных соотношений операторов чисел заполнения, входящих в (6.12a), с операторами рождения и уни-



Фиг. 6.1. а — реалистичные амплитуды  $g_q$ ; б — упрощенные амплитуды  $g_q$ .

чтожения отдельных фермионов позволяет нам сразу рассчитать следующие коммутаторы:

$$[\Delta_{KK}, D_{2K}^\dagger] = 2D_{2K}^\dagger/\Omega, \quad (6.14a)$$

$$[\Delta_{KK}, D_{2K}] = -2D_{2K}/\Omega. \quad (6.14b)$$

Из формул (6.14) и (6.9) вытекает, что для каждого значения  $K$  можно указать три оператора:

$$S_z = -\frac{1}{2} \Omega (1 - \Delta_{KK}) = \frac{1}{2} (N - \Omega), \quad (6.15a)$$

$$S_+ = \Omega^{\frac{1}{2}} D_{2K}^\dagger = \sum_q a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{K-q, \downarrow}, \quad (6.15b)$$

$$S_- = \Omega^{\frac{1}{2}} D_{2K} = \sum_q a_{K-q, \downarrow} a_{K+q, \uparrow}, \quad (6.15b)$$

которые удовлетворяют точно таким же коммутационным соотношениям как проекции момента количества движения:

$$[S_z, S_+] = S_+, \quad [S_z, S_-] = -S_-, \quad [S_+, S_-] = 2S_z. \quad (6.16)$$

Операторы вида (6.15а) — (6.15в) по той причине, что они удовлетворяют коммутационным соотношениям для проекций момента количества движения, иногда называют операторами квазиспина. По аналогии с теорией обычного момента количества движения можно теперь и для рассматриваемых операторов также определить «оператор полного квазиспина»:

$$S^2 = \frac{1}{2}(S_+S_- + S_-S_+) + S_z^2. \quad (6.17)$$

Из квантовой теории момента количества движения мы хорошо знаем, что оператор  $S^2$ , определенный формулой (6.17), коммутирует со всеми операторами (6.15) и имеет собственные числа, равные  $S(S+1)$ , где  $S$  — целое или полуцелое положительное число или нуль.

Рассмотрим теперь состояние

$$(D_{2K}^\dagger)^m |0\rangle. \quad (6.18)$$

Оно описывает  $m$  дейтронов, занимающих одно и то же дейтронное состояние с импульсом  $2\hbar K$ . Выше из рассмотрения формул (6.9) — (6.12) мы уже сделали заключение, что наша квантовая система ведет себя как система  $m$  бозонов в предельном случае, когда отношение  $N/\Omega$  мало. В другом предельном случае, когда  $m = \Omega$ , число фермионов в состоянии (6.18) будет равно полному числу всех имеющихся однофермионных состояний в (6.5). Совершенно очевидно, что имеется только одно состояние нашей квантовой многочастичной системы, в котором каждое однофермионное состояние занято одним фермионом:

$$\prod_q a_{K+q}^\dagger a_{K-q}^\dagger |0\rangle. \quad (6.19)$$

Непосредственно очень легко убедиться, что состояния (6.18) и (6.19) при  $m = \Omega$  совпадают. Действительно, поскольку квадрат любого фермионного оператора рождения обращается в нуль, то в состоянии (6.18) вносят вклад только те операторные слагаемые, в которых ни один фермионный оператор рождения не встречается дважды. Полное число операторов рождения, входящих в каждое операторное произведение, равно числу возможных однофермионных состояний, включенных в (6.5), т. е. равно  $\Omega$ , поэтому каждый оператор рождения должен входить в произведение, дающее ненулевой вклад в (6.18), один раз, а таким является только одно-единственное из рассматриваемых операторных сла-

гаемых. Порядок следования фермионных операторов в этом сла-  
гаемом никакого значения не имеет, так как перестановка двух  
фермионных операторов рождения приводит лишь к изменению  
знака.

Таким образом, при  $m \ll \Omega$  вектор состояния (6.18) описывает  
состояние системы, составленной из небольшого числа бозонов,  
а при  $m = \Omega$  он описывает состояние системы, составленной из фер-  
мионов, с полностью занятыми ее однофермионными состояниями.  
Особый интерес, однако, представляет наша многочастичная систе-  
ма при  $m = \frac{1}{2}\Omega$ , когда ее уже нельзя аппроксимировать бозон-  
ной системой и когда ее состояния не все заполнены. В силу того  
что коммутационные соотношения для операторов (6.15) являются  
в точности коммутационными соотношениями для проекций  
момента количества движения, наша простая модель позволяет  
исследовать и эту область значений  $m$ .

Рассмотрим оператор «числа дейтронов»

$$N_D = D_{2K}^\dagger D_{2K} = \Omega^{-1} \sum_{qq'} a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{K-q, \downarrow}^\dagger a_{K-q', \downarrow} a_{K+q', \uparrow}. \quad (6.20)$$

Если дейтронов мало, т. е. справедливо бозонное описание нашей  
системы, то собственные значения оператора (6.20) дают как раз  
число дейтронов, находящихся в состоянии  $2\hbar K$ . Если, напротив,  
дейтронов много, то этот оператор правильнее рассматривать как  
оператор, составленный из фермионных операторов рождения  
и уничтожения, т. е. как двухчастичный оператор вида (5.52), кото-  
рый уничтожает два фермиона в некоторых двух однофермион-  
ных состояниях и одновременно рождает два фермиона в некото-  
рых других двух однофермионных состояниях. Такой оператор  
описывает некоторое двухчастичное взаимодействие между фер-  
мионами.

### § 3. Простая модельная система из перекрывающихся связанных фермионных пар

Рассмотрим следующий оператор:

$$V = -\varepsilon_D N_D = -\frac{\varepsilon_D}{\Omega} \sum_{qq'} a_{K+q, \uparrow}^\dagger a_{K-q, \downarrow}^\dagger a_{K-q', \downarrow} a_{K+q', \uparrow}, \quad (6.21)$$

где  $\varepsilon_D$  — некоторая постоянная. На этот оператор можно  
посмотреть, как на оператор, описывающий некоторое двухчастич-  
ное взаимодействие, интенсивность которого  $G = \varepsilon_D/\Omega$ . Дей-  
тронное состояние с импульсом  $2\hbar K$ , как в этом легко убедиться,

является собственным состоянием оператора  $V$  с собственным значением, равным  $-\epsilon_D$ , так как

$$\begin{aligned} -\epsilon_D N_D D_{2K}^\dagger |0\rangle &= -\epsilon_D D_{2K}^\dagger D_{2K} D_{2K}^\dagger |0\rangle = -\epsilon_D D_K^\dagger [D_{2K}, D_{2K}^\dagger |0\rangle = \\ &= -\epsilon_D D_{2K}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.22)$$

С другой стороны, любое двухфермионное состояние, которое ортогонально этому дейтронному состоянию с импульсом  $2\hbar\mathbf{K}$ , тоже является собственным состоянием нашего оператора  $V$  с собственным значением, равным нулю. Строгое доказательство, основанное на коммутационных соотношениях квазиспиновых операторов, мы приведем ниже. Здесь же мы постараемся понять этот факт, исходя из предположения, что дейтроны ведут себя как бозоны, не зависящие от имеющихся в системе свободных фермионов, когда полное число частиц в системе мало.

Оператор  $V$ , определенный (6.21), как мы уже сказали, описывает некоторое двухчастичное взаимодействие, которое заставляет отдельные фермионы связываться в пары (или дейтроны). Когда число частиц в системе мало, собственные состояния оператора  $V$  можно рассматривать как состояния, имеющие некоторое число связанных пар (или дейтронов) и определенное число свободных фермионов. Соответствующие собственные значения оператора  $V$  для этих состояний равны просто произведению энергии  $-\epsilon_D$ , умноженной на число дейтронов, имеющихся в каждом данном состоянии. Таким образом, величина  $\epsilon_D$  выступает как энергия связи дейтрона. Исключительно простой вид взаимодействия  $V$  позволяет нам найти точные собственные состояния и собственные значения оператора  $V$ , а значит, и исследовать свойства нашей квантовой системы из перекрывающихся связанных пар даже в тех случаях, когда число частиц в ней не мало по сравнению с числом возможных одночастичных состояний.

Мы считаем, что в нашей упрощенной модельной системе имеется связанное дейтронное состояние только одного типа (с одним определенным значением волнового вектора дейтрона, равным  $2\mathbf{K}$ ). Полный импульс реального физического дейтрона, конечно, может иметь любое значение. Таким образом, истинное двухчастичное взаимодействие, отвечающее системе физических дейтронов, должно быть суммой операторов взаимодействия вида (6.21), берущейся по всем значениям  $\mathbf{K}$ , а не сводится просто к одному слагаемому в этой сумме. В нашей модели все двухчастичные состояния, ортогональные данному дейтронному состоянию с импульсом  $2\hbar\mathbf{K}$ , являются *несвязанными*, т. е. в нашей модели мы пренебрегаем наличием связанных состояний дейтронов с импульсами  $2\hbar\mathbf{K}'$ , отличающимися от импульса  $2\hbar\mathbf{K}$ , который мы фиксировали для нашего взаимодействия (6.21). Это, разумеется, нефизичное допущение серьезно не сказывается на основных



физических выводах в отношении системы, в которой очень большое число связанных фермионных пар занимает *одно и то же* состояние. Просто можно считать, что мы выбрали в качестве такого состояния состояние с импульсом  $2\hbar K$ . Собственные значения нашего оператора взаимодействия (6.21) пропорциональны числу связанных фермионных пар, находящихся именно в этом состоянии.

Оператор взаимодействия  $V$  можно выразить через операторы квазиспина (6.15) следующим образом:

$$V = -\varepsilon_D S_+ S_- / \Omega = -\varepsilon_D \{S^2 - S_z^2 + S_z\} / \Omega. \quad (6.23)$$

Отсюда видим, что все состояния, являющиеся одновременно собственными состояниями операторов  $S^2$  и  $S_z$ , будут также и собственными состояниями оператора взаимодействия  $V$ . Поскольку оператор  $S_z$  выражается через оператор полного числа частиц и число фермионных состояний  $\Omega$ , то любое состояние нашей модельной системы, в котором полное число частиц имеет определенное значение, будет обязательно являться собственным для оператора  $S_z$ . В частности, таковым является вакуумное состояние, а также состояние (6.18), имеющее  $m$  дейтронов с импульсами  $2\hbar K$ . Действительно,

$$S_z |0\rangle = -\frac{1}{2} \Omega |0\rangle, \quad (6.24a)$$

$$S_z (D_{2K}^\dagger)^m |0\rangle = \frac{1}{2} (2m - \Omega) (D_{2K}^\dagger)^m |0\rangle. \quad (6.24b)$$

Оператор  $S_-$  выражается через операторы уничтожения фермионов [см. (6.15в)] и поэтому, действуя на вакуумное состояние, дает нуль:

$$S_- |0\rangle = 0. \quad (6.25)$$

Вакуумное состояние должно быть собственным состоянием оператора  $S^2$ , поскольку оно является собственным состоянием оператора  $S_z$ , и оператор  $S_-$ , действуя на вакуумное состояние, дает нуль. Следовательно, вакуумное состояние действительно должно быть собственным состоянием оператора  $S^2$ , соответствующим собственному значению  $S = \frac{1}{2}\Omega$ . (Мы не используем общепринятого обозначения  $S'$  для собственных значений  $S'$  ( $S' + 1$ ) оператора  $S^2$ .) Оператор  $D_{2K}^\dagger$  отличается от соответствующего квазиспинового оператора  $S_+$  только числовым множителем [см. (6.15)], и поэтому он должен коммутировать с оператором полного квазиспина  $S^2$ :

$$\{S^2, D_{2K}^\dagger\} = 0. \quad (6.26a)$$

Отсюда следует, что все  $m$ -дейтронные состояния (6.18) являются собственными состояниями оператора  $S^2$ , причем с одним и тем же собственным значением:

$$S^2 (D_{2k}^\dagger)^m |0\rangle = (D_{2k}^\dagger)^m S^2 |0\rangle = \frac{1}{2} \Omega \left( \frac{1}{2} \Omega + 1 \right) (D_{2k}^\dagger)^m |0\rangle. \quad (6.26б)$$

Значит,  $m$ -дейтронные состояния (6.18) будут также собственными состояниями оператора взаимодействия  $V$ , так как

$$\begin{aligned} V (D_{2k}^\dagger)^m |0\rangle &= \\ &= -(\varepsilon_D/\Omega) \left\{ \frac{\Omega}{2} \left( \frac{\Omega}{2} + 1 \right) - \left( \frac{2m-\Omega}{2} \right)^2 + \frac{2m-\Omega}{2} \right\} (D_{2k}^\dagger)^m |0\rangle = \\ &= -m\varepsilon_D \left\{ 1 - \frac{m-1}{\Omega} \right\} (D_{2k}^\dagger)^m |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Собственное значение оператора  $V$  для вакуумного состояния равно нулю, для 1-дейтронного состояния равно точно  $-\varepsilon_D$ . Собственное значение оператора для  $m$ -дейтронного состояния равно приближенно  $-m\varepsilon_D$ , если не учитывать поправок, которые малы, когда  $m$  мало по сравнению с  $\Omega$ . Обратите внимание на то, что эти поправки входят с *обратным* знаком, т. е. *уменьшают* энергию связи.

Причину появления в (6.27) дополнительного множителя (заключенного в фигурные скобки) можно понять следующим образом. Он возникает из-за принципа Паули. Ведь дейтроны на самом деле представляют собой не бозоны, а частицы, состоящие из фермионов, причем последние не могут занимать одно и то же квантовое состояние. Действие принципа Паули можно легко проследить на простом примере 2-дейтронного состояния. Если бы оператор  $(D_{2k}^\dagger)^2$  записать формально без учета принципа Паули, то в него вошли бы и такие операторные слагаемые, в которых дважды встречались бы операторы рождения фермионов в одном и том же однофермионном состоянии. Все эти слагаемые, однако, на самом деле равны нулю.

Если бы наши дейтроны были построены из элементарных бозонов или из нетождественных фермионов, то в этом случае указанные операторные слагаемые, в которых по два совершенно одинаковых оператора рождения фермионов стоят рядом, не были бы запрещены и вносили бы свой вклад в оператор  $(D_{2k}^\dagger)^2$ . Однако поскольку рассматриваемые нами дейтроны все же построены из элементарных тождественных фермионов, то такие операторные слагаемые, которые соответствуют двум фермионам, находящимся в одном и том же состоянии, должны обращаться в нуль. Разумеется, формально они обращаются в нуль просто потому, что равен нулю квадрат любого фермионного оператора рождения. Доля рассматриваемых операторных членов от общего числа членов

суммы равна  $1/\Omega$ . Как раз такой порядок имеет поправка  $1/\Omega$  в формуле (6.27) в случае состояния, заполненного двумя дейтронами. При увеличении числа дейтронов, заполняющих данное дейтронное состояние с импульсом  $2\hbar K$ , эта поправка возрастает. Очевидная причина заключается в следующем. При увеличении числа дейтронов отдельные фермионы каждого дейтрона *уже не могут точно образовывать* такой волновой пакет, энергия которого минимальна; это связано с тем, что фермионы не могут занимать те однофермионные состояния, которые соответствуют минимальному значению энергии. Фермионы, имеющиеся в других дейтронах, занимают определенные однофермионные состояния и ограничивают число свободных однофермионных состояний, не позволяя фермионам рассматриваемого дейтрона находиться в тех состояниях, которые уже заняты.

Рассмотрим теперь какое-нибудь несвязанное двухнуклонное состояние  $|2\rangle$ , ортогональное построенному выше дейтронному состоянию. Как и любое двухчастичное состояние, оно является собственным для оператора  $S_z$  с собственным значением  $\frac{1}{2}(2 - \Omega)$ , т. е.

$$S_z |2\rangle = \left(-\frac{1}{2}\Omega + 1\right) |2\rangle. \quad (6.28)$$

Используя условие ортогональности состояния  $|2\rangle$  к нашему дейтронному состоянию, получаем

$$\langle 0 | D_{2K} |2\rangle = 0 = \langle 0 | S_- |2\rangle / \Omega^{\frac{1}{2}}, \quad (6.29a)$$

$$S_- |2\rangle = 0. \quad (6.29b)$$

Таким образом, несвязанное двухнуклонное состояние  $|2\rangle$  является одновременно и собственным состоянием операторов  $S_z$  и  $S^2$  с собственным значением  $S = \frac{1}{2}\Omega - 1$ . Подставляя эти собственные значения в формулу (6.23), мы видим, что рассматриваемое состояние является собственным состоянием оператора  $V$  с собственным значением, равным нулю:

$$V |2\rangle = 0. \quad (6.30)$$

Такой результат следовало ожидать, поскольку двухнуклонное состояние  $|2\rangle$  не содержит дейтронов, а состоит из двух не связанных друг с другом нуклонов. Рассмотрим теперь состояние  $D_{2K}^\dagger |2\rangle$ , получающееся добавлением дейтрона к двухнуклонному состоянию  $|2\rangle$ . Из коммутационного соотношения (6.26a) следует, что это состояние будет собственным состоянием оператора  $S^2$  с тем же собственным значением, что и состояние  $|2\rangle$ . С другой

стороны, рассматриваемое состояние является четырехчастичным состоянием, а потому оно будет собственным состоянием оператора  $S_2$  с собственным значением, равным  $-\frac{1}{2}\Omega + 2$ . Отсюда получаем

$$VD_{2K}^\dagger |2\rangle = -\epsilon_D (1 - 2\Omega^{-1}) D_{2K}^\dagger |2\rangle. \quad (6.31)$$

Из формулы (6.31) видно, что дополнительное присутствие в четырехчастичном состоянии двух свободных нуклонов уменьшает энергию связи дейтрона в  $(1 - 2\Omega^{-1})$  раз. Это уменьшение в два раза больше уменьшения энергии связи для четырехчастичного состояния, образованного двумя дейтронами. Другими словами, влияние двух свободных нуклонов на энергию связи дейтрона оказывается *вдвое сильнее*, чем влияние двух нуклонов, связанных в дейтроне. Это вполне понятно, так как если две дополнительно присутствующие частицы *не связаны* друг с другом, то они занимают два однофермионных состояния совершенно независимым образом, т. е. отнимают тем самым по два однофермионных состояния у частиц данной связанной фермионной пары. Действительно, если, скажем, один из двух свободных нуклонов находится в состоянии  $K + q_1, \uparrow$ , а другой — в состоянии  $K - q_2, \downarrow$ , то однофермионные состояния  $K - q_1, \downarrow$  и  $K + q_2, \uparrow$  уже не могут занимать нуклоны, связанные в дейтрон, так как если один из нуклонов дейтрона находится в состоянии  $K + q, \uparrow$ , то другой должен обязательно находиться в состоянии  $K - q, \downarrow$ . С другой стороны, если два добавочных нуклона *связаны*, т. е. образуют еще один дейтрон, то они занимают два однофермионных состояния, принадлежащие одной и той же связанной фермионной паре, так как эти частицы сильно коррелируют друг с другом и обязательно должны находиться в двух соответственных состояниях. Иначе говоря, если рассматриваемые дополнительные нуклоны находятся в состояниях  $K + q, \uparrow$  и  $K - q, \downarrow$ , то для нуклонов второго дейтрона оказываются запрещенными только эти два состояния, а *не четыре* состояния, как прежде.

Обобщим теперь наши рассуждения и применим их к состоянию нашей многочастичной системы с любым числом дейтронов и свободных нуклонов. Возьмем сначала состояние, в котором имеется  $\nu$  свободных нуклонов и вообще нет дейтронов. Такое состояние обладает тем свойством, что для него

$$D_{2K} |v\rangle = 0 = S_- |v\rangle. \quad (6.32)$$

Дейтронный оператор уничтожения, действуя на состояние  $|v\rangle$  дает нуль, поскольку в последнем нет связанных в дейтроны нуклонов. Наше состояние, следовательно, оказывается одновре-

менно собственным состоянием операторов  $S^2$  и  $S_z$  с собственными значениями  $S = -S_z = \frac{1}{2}(\Omega - \nu)$ .

Из рассмотренного состояния (6.32) мы построим теперь состояние, содержащее  $\nu$  свободных нуклонов и  $m$  дейтронов, просто действуя  $m$  раз на состояние  $| \nu \rangle$  дейтронным оператором рождения. Так мы получаем состояние

$$| m, \nu \rangle = (D_{2k}^\dagger)^m | \nu \rangle. \quad (6.33)$$

Построенное состояние будет собственным для оператора  $S^2$ , соответствующим тому же самому собственному значению, что и состояние (6.32). Оно также будет собственным состоянием и для оператора  $S_z$  с собственным значением, равным  $\frac{1}{2}(\nu + 2m - \Omega)$ . Таким образом,

$$S^2 | m, \nu \rangle = \left( \frac{\Omega - \nu}{2} \right) \left( \frac{\Omega - \nu}{2} + 1 \right) | m, \nu \rangle, \quad (6.34a)$$

$$S_z | m, \nu \rangle = \left( \frac{2m + \nu - \Omega}{2} \right) | m, \nu \rangle. \quad (6.34b)$$

Следовательно, состояние  $| m, \nu \rangle$  будет собственным состоянием оператора  $V$  со следующим собственным значением:

$$\begin{aligned} V | m, \nu \rangle &= -m\varepsilon_D \left\{ 1 - \frac{m-1+\nu}{\Omega} \right\} | m, \nu \rangle = \\ &= -mG\Omega \left\{ 1 - \frac{m-1+\nu}{\Omega} \right\} | m, \nu \rangle. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Собственное значение (6.35) равно энергии связи дейтрона, умноженной на  $m$  и на коэффициент в фигурных скобках, учитывающий влияние принципа Паули. Это влияние прямо пропорционально величине  $m - 1 + \nu$ , равной уменьшенному на единицу числу всех дейтронов, сложенному с числом имеющихся свободных нуклонов.

Полученная формула (6.35) позволяет построить все нужные нам решения уравнения Шредингера, в котором гамильтонианом является оператор  $V$ , определенный (6.21). Состояния  $m, \nu$  образуют полный набор собственных состояний этого гамильтониана, а формула (6.35) дает все соответствующие собственные значения.

Использованный метод решения модельной задачи наглядно иллюстрирует исключительную пользу чисто алгебраических методов в квантовой механике, которые оказываются весьма эффективными во многих ее задачах. Выше мы сначала нашли операторы, удовлетворяющие простым коммутационным соотношениям (т. е. коммутационным соотношением для операторов момента количества движения). После этого мы смогли воспользоваться

алгебраическими результатами теории квантовомеханического момента количества движения, но теперь, однако, уже для существенно другой физической задачи. Хотя квазиспиновые операторы (6.15) и не соответствуют никаким реальным «физическим» моментам количества движения, однако они удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям, что и операторы момента количества движения, и этого оказалось достаточно для того, чтобы мы смогли использовать все чисто алгебраические результаты, известные в отношении физического момента количества движения.

#### § 4. Сверхпроводимость и число сеньорити

Согласно теории БКШ, волновая функция электронов сверхпроводящего основного состояния сверхпроводника является волновой функцией, в которой имеется большое число перекрывающихся (т. е. коррелированных, или связанных) электронных пар. Характерной особенностью сверхпроводника является наличие «энергетической щели» между основным и ближайшими низко расположенными возбужденными состояниями. Эта энергетическая щель возникает из-за того, что нам нужно разрушить по крайней мере одну из имеющихся в основном состоянии парных корреляций, если мы хотим получить возбужденное состояние сверхпроводника, а для этого требуется затратить определенную энергию. Основные свойства энергетической щели хорошо описываются нашей простой моделью. В этой модели *основным* состоянием при наличии в системе  $2m$  частиц будет состояние  $|m, 0\rangle$ , в котором все частицы связаны в «дейтроны». Используя формулу (6.35), легко вычислить энергию возбуждения первого возбужденного состояния, т. е. состояния  $|m-1, 2\rangle$ , получающегося при разрушении одного дейтрона в основном состоянии  $|m, 0\rangle$  и образовании двух свободных нуклонов. В результате имеем

$$\begin{aligned} E_{m-1, 2} - E_{m, 0} &= \varepsilon_D \left[ -(m-1) \left\{ 1 - \frac{m-2+\varrho}{\Omega} \right\} + m \left\{ 1 - \frac{m-1}{\Omega} \right\} \right] = \\ &= \varepsilon_D \left\{ \left( 1 - \frac{m}{\Omega} \right) + \frac{m}{\Omega} \right\} = \varepsilon_D = G\Omega. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Хотя формула (6.36) как раз и дает энергию связи «дейтрона», однако наивный вывод о том, что для разрушения каждого дейтрона в основном состоянии нашей системы необходимо затрачивать энергию, в точности равную энергии связи  $\varepsilon_D$ , неверен. Действительно, энергия связи всей системы в расчете на один дейтрон не равна  $\varepsilon_D$ , а из-за действия принципа Паули несколько меньше, как это непосредственно видно из формулы (6.35). Энер-

гия (6.36) складывается на самом деле из *двух* совершенно различных вкладов.

Распад одного дейтрона в системе на два свободных нуклона сопровождается двумя эффектами. Во-первых, происходит уменьшение полного числа дейтронов в нашей системе на единицу. Чтобы отнять у системы один дейтрон, требуется затратить энергию, равную средней энергии связи дейтрона в системе, уменьшенную из-за действия принципа Паули на соответствующий множитель, а именно энергию  $\varepsilon_D (1 - m/\Omega)$ . Во-вторых, после уменьшения числа дейтронов на единицу усиливается действие принципа Паули на каждый из оставшихся в системе дейтронов, что отражается в уменьшении на единицу числителя во втором слагаемом в фигурных скобках в формуле (6.35). Энергия связи каждого из оставшихся дейтронов уменьшается, и это приводит к увеличению полной энергии системы на величину  $\varepsilon_D m/\Omega$ . Сумма двух указанных изменений энергии оказывается в точности равной  $\varepsilon_D$  в рассматриваемом случае. Если  $m = 1/2\Omega$ , т. е. занята половина всех имеющихся у нас однофермионных состояний, то оба указанных вклада в энергию возбуждения системы одинаковы по величине. Иначе говоря, в этом случае просто на уменьшение числа дейтронов в системе на единицу затрачивается только *половина* той энергии, которая требуется на разрушение одного дейтрона. Другая половина энергии идет на ослабление связи в остающихся в системе дейтронах, вызванное усилением действия принципа Паули в системе в результате распада одного дейтрона на два свободных нуклона.

В более реалистичной модели сверхпроводника «дейтронное» состояние характеризуется не одним заданным волновым числом  $2K$ , которое мы с самого начала зафиксировали в нашей простой модели. Оно может обладать любыми значениями импульса центра масс. Мы можем ожидать, что в такой более совершенной модели основным состоянием будет состояние, в котором все дейтроны обладают нулевым волновым числом  $2K = 0$ . Очевидно также, что в этой модели имеются возбужденные состояния нового типа, в которых один из дейтронов будет находиться в связанном дейтронном состоянии с волновым числом  $2K \neq 0$ , а остальные — в связанных состояниях с волновым числом  $2K = 0$ . Если бы дейтроны вели себя как свободные бозоны, мы, следовательно, должны были бы заключить, что в нашей модели существует непрерывный спектр элементарных возбуждений, не имеющий энергетической щели. Для него возбужденные состояния получались бы при сообщении отдельному бозону, представляющему дейтрон, сколь угодно малого импульса и малой кинетической энергии без разрушения самого дейтрона и без уменьшения энергии связи этого дейтрона.

Однако дейтроны — не свободные бозоны, а фермионные пары, и поэтому энергия связи дейтрона с волновым числом  $2K \neq 0$  все же уменьшается по сравнению с дейтроном с волновым числом  $2K = 0$  вследствие действия принципа Паули. Внутренние силы связи в данном дейтроне ослабляются из-за присутствия других фермионов в системе. Это ослабление минимально, когда все фермионы системы связаны в дейтронные состояния, обладающие *одинаковыми значениями полного импульса* с данным дейтроном. Дело в том, что ослабление энергии связи дейтрона, вызванное связанной фермионной парой, полный импульс которой не равен импульсу данного дейтрона, *вдвое сильнее*, чем то, которое вызывается дейтроном с таким же, как у заданного дейтрона, значением полного импульса. Поэтому изменение импульса одного из дейтронов, имеющих в основном состоянии, приводит к усилению действия принципа Паули на *все* оставшиеся в основном состоянии дейтроны и, следовательно, требуется затратить некоторую конечную энергию на возбуждение дейтрона с импульсом  $2K \neq 0$ , даже если изменение импульса дейтрона, первоначально имевшегося в основном состоянии, бесконечно мало. Таким образом, действие принципа Паули приводит к появлению энергетической щели в спектре рассматриваемых элементарных возбуждений. Этот эффект характерен именно для системы перекрывающихся связанных фермионных пар; он отсутствовал бы, если бы дейтроны вели себя просто как независимые бозоны.

Рассмотрим теперь такое состояние нашей модельной системы (6.21), в котором все дейтроны находятся в одном и том же связанном дейтронном состоянии с волновым вектором  $2K \neq 0$ . Система в целом в этом случае обладает конечным макроскопическим импульсом, и в ней имеется конечный поток частиц. Этот поток полностью подобен незатухающему электрическому току в сверхпроводнике, и он так и был объяснен в теории БКШ, согласно которой он является электрическим током связанных пар электронов с противоположными спинами. Гамильтониан нашей модельной системы (6.21), конечно, очень упрощенный вариант гамильтониана, действительно рассматриваемого в теории БКШ, хотя он и отражает многие его качественные особенности. Гамильтониан в теории БКШ отличается от нашего гамильтониана (6.21) в двух отношениях. Во-первых, он имеет еще операторное слагаемое с кинетической энергией отдельных электронов, и, во-вторых, различные операторные слагаемые в гамильтониане взаимодействия не просто складываются, как в формуле (6.21), а перед ними стоят еще некоторые коэффициенты, зависящие от  $q$  и  $q'$ . Последнее обстоятельство требует использования «реалистичной» функции связанного состояния дейтрона, изображенной на фиг. 6.1, а, а не сугубо модельной функции в виде «прямоугольного» распределения, изображенной на фиг. 6.1, б.



Электрический ток связанных пар электронов качественно отличается от обычного электрического тока в металле, переносимого электронами проводимости. Электроны, переносящие обычный электрический ток, имеют статистический разброс по импульсам и очень быстро приходят в тепловое равновесие с ионами решетки металла, потому что эффективны взаимодействия между отдельными электронами и колебаниями решетки (фононами). Напротив, сверхпроводящий ток, являющийся потоком связанных электронных пар, имеющих в точности одинаковые значения импульса, характеризует не равновесное, а метастабильное состояние, поскольку для перехода к состоянию равновесия требуется одновременно изменить значения импульсов у всех электронных пар, а это очень трудно сделать. Если взаимодействие электронов с колебаниями решетки разрушает обычный электрический ток путем актов рассеяния отдельных электронов, то это взаимодействие может воздействовать на электроны, когда они связаны в пары, только разрушив сразу все эти пары.

Поскольку для разрушения одной электронной пары необходимо затратить конечную энергию, равную по порядку величины энергии энергетической щели, то при низких температурах, при которых тепловая энергия еще мала по сравнению с энергией щели, число свободных, несвязанных электронов в системе будет сравнительно мало. При таких условиях обмен энергией между электронами и ионной решеткой металла будет происходить как за счет рассеяния свободных электронов, так и за счет разрушения и рекомбинации связанных пар электронов. Этот обмен приведет к установлению некоторого метастабильного состояния равновесия нашей системы, при котором число разрушенных пар будет даваться формулой распределения Больцмана. Если среднее число разрушенных пар в системе будет мало, то рассматриваемый механизм релаксации энергии не сможет привести к изменению общего макроскопического импульса всех связанных пар, так как вероятность флуктуации с разрушением большого числа пар пренебрежимо мала. При высоких температурах, когда тепловая энергия станет достаточной для разрушения всех электронных пар, когерентность сверхпроводящего тока нарушится, и система перейдет в нормальное равновесное состояние.

В *нижнем* приближении в модели оболочек в теории ядра считается, что каждый индивидуальный нуклон движется по своей независимой орбите в некотором центральном поле сил, создаваемом усредненным взаимодействием этого нуклона со всеми остальными нуклонами ядра. При этом у нас возникает набор одночастичных уровней в ядре, получаемых в результате решения уравнения Шредингера с соответствующим самосогласованным потенциалом. Если этот потенциал сферически симметричен, то каждый одночастичный уровень энергии вырожден, так как состояние

с моментом количества движения  $j$  будет  $(2j + 1)$ -кратно вырождено. Если используемый центрально-симметричный потенциал задается потенциалом трехмерного гармонического осциллятора, то появится еще и дополнительное вырождение. Если несколько частиц нужно распределить по небольшому числу вырожденных одночастичных состояний, то получатся состояния многочастичной системы с высокой кратностью вырождения, так как имеется много различных способов распределения данных частиц по этим вырожденным состояниям.

В *следующем* приближении в оболочечной модели в теории ядра это вырождение снимается, так как в нем учитываются так называемые «остаточные взаимодействия», т. е. разница между реальным нуклон-нуклонным взаимодействием и усредненным взаимодействием, используемым для построения центрально-симметричного потенциала. Во многих случаях, оказывается, можно считать, что остаточное взаимодействие имеет такой же вид, как и оператор  $V$  в нашей упрощенной модели, т. е. дается формулами (6.20) и (6.24); но в этом случае надо положить  $K = 0$  и считать квантовое число  $q$  проекцией момента количества движения, а не импульсом. Так мы имеем

$$V = -G \sum_{\substack{m>0 \\ m'>0}} a_{njm}^{\dagger} a_{nj, -m}^{\dagger} a_{njm'} = -GS_+S_-, \quad (6.37a)$$

где  $a_{njm}^{\dagger}$  — операторы рождения нуклонов в состояниях модели оболочек, характеризуемых квантовыми числами  $n, j, m$ , причем мы рассматриваем только взаимодействия между тождественными нуклонами, т. е. *либо* нейтронами, *либо* протонами. В основной схеме классификации с квантовым числом «сеньорити» рассматривают лишь взаимодействия нуклонов внутри какой-либо одной оболочки, характеризующей определенными значениями  $n$  и  $j$ . В «обобщенной схеме сеньорити» берут несколько оболочек и по этим оболочкам производят суммирование.

Квазиспиновый сдвиговой оператор теперь имеет следующий вид:

$$S_+ = \sum_{m>0} a_{njm}^{\dagger} a_{nj, -m}^{\dagger}; \quad (6.37b)$$

он является оператором рождения пары нуклонов в состоянии с нулевым полным моментом количества движения.

Оказывается, что в атомных ядрах, как правило, всегда имеются коррелированные, или связанные, пары нуклонов, аналогичные «дейтронам» из нашей упрощенной модели, рассмотренной в этой главе. Конечно, эти пары нуклонов не представляют собой реальных физических дейтронов. Они являются просто коррелированными состояниями пар тождественных нуклонов, обладаю-

щими нулевым моментом количества движения. Взаимодействие (6.37а) в теории ядра называется поэтому «спаривающим взаимодействием». Квантовые числа состояний  $|m, \nu\rangle$  из разобранный выше упрощенной модели оказываются при этом как раз в точности квантовыми числами состояний ядра, классифицируемых с помощью так называемого «квантового числа сеньорити». Состояние системы, состоящей из  $n$  нуклонов, в котором  $\nu$  частиц не объединены в пары и в котором имеется  $m = \frac{1}{2}(n - \nu)$  пар нуклонов, называется в этой классификации состоянием «с квантовым числом сеньорити, равным  $\nu$ ».

Взаимодействие (6.37а) мы взяли в столь же простом виде, как и взаимодействие (6.20) и (6.21). Однако теперь необходимо заметить следующее. Оператор (6.37б) действительно можно рассматривать как оператор рождения пары нуклонов в состоянии с нулевым моментом количества движения, если только условиться необычным способом выбрать фазы сферических функций, отличающимся от общепринятого выбора фаз по Кондону — Шортли (для функций двух связанных моментов количества движения). Используя фазы Кондона — Шортли, мы должны вместо (6.37б) писать

$$S_+ = \sum_{m>0} (-1)^{j-m} a_{njm}^\dagger a_{nj, -m}^\dagger \quad (6.38a)$$

Оператор взаимодействия при этом будет иметь следующий вид:

$$V = -GS_+S_- = -G \sum_{\substack{m>0 \\ m'>0}} (-1)^{m'+m} a_{njm}^\dagger a_{nj, -m}^\dagger a_{njm'} a_{nj, -m'}. \quad (6.38б)$$

В обобщенной схеме классификации с квантовым числом сеньорити, в которой рассматривается несколько нуклонных оболочек, мы можем определить оператор  $S_+$  так:

$$S_+ = \sum_{n, j} \sum_{m>0} C_{nj} (-1)^{j-m} a_{njm}^\dagger a_{nj, -m}^\dagger \quad (6.39a)$$

здесь проводится суммирование по отдельным оболочкам, а  $C_{nj}$  — некоторые фазовые множители, зависящие от  $n$  и  $j$ , но не зависящие от  $m$ . Для оператора взаимодействия получаем формулу

$$V = -G \sum_{n, j, n', j'} \sum_{\substack{m>0 \\ m'>0}} C_{nj} C_{n'j'}^* (-1)^{m'+m} \times \\ \times a_{njm}^\dagger a_{nj, -m}^\dagger a_{n'j'm'} a_{n'j', -m'}. \quad (6.39б)$$

# *IV. Распад каонов*

## *в изложении для*

### *пешеходов*

#### *Введение*

В гл. 7 изложена теория распада каонов, на примере которой мы иллюстрируем методы рассмотрения временных процессов и квантовых переходов в квантовой механике, вводя читателя в «будничные» реальный мир повседневных приложений квантовой механики к решению новых задач. Студент, изучающий основы физики, обычно бывает поражен ясностью и элегантностью классической механики и классической электродинамики и красотой элементарной квантовой механики (на примере, скажем, решения задачи об атоме водорода). Теперь для него наступит время сурового пробуждения. Если он действительно желает вступить на путь оригинальных исследований, то должен забыть о прекрасном мире точно решаемых задач. Приближаясь к переднему краю современной физики с ее нерешенными или наполовину решенными задачами, нельзя рассчитывать даже на то, что удастся сразу, исходя из первых принципов, построить гамильтониан нужной задачи, составить уравнение Шредингера и затем решить его либо точно, либо с помощью ряда обоснованных, все более уточняющихся приближений. Приходится собирать по кусочкам и крупинкам уже установленные факты и подгонять их друг к другу, чтобы действительно добиться прогресса в получении новых знаний о природе.

Распад каонов дает замечательный и достаточно простой пример использования квантовой механики в современных научных исследованиях. Он выявляет много интересного, а отсутствие спинов у каонов упрощает формальное их описание. В этой главе мы начинаем с того, что принимаем в качестве исходных факт существования каонов и пионов и факт распада каонов на пионы. Эти исходные данные мы не выводим из каких-либо фундаментальных физических принципов, а просто используем для построения некоторого «феноменологического» гамильтониана. Предпола-

гаемое знакомство читателя с формализмом вторичного квантования, введенным в гл. 5, позволяет нам выписать наш феноменологический гамильтониан с самого начала во вторично квантованном виде. Далее мы учитываем ограничения, налагаемые на вид гамильтониана законами сохранения и требованиями принципов инвариантности. Полученное нами после этого вполне определенное уравнение Шредингера мы затем решаем, применяя к нему временную теорию возмущений. Эту теорию возмущений мы сначала используем в рамках традиционного формализма Гайтлера с его простой физической интерпретацией зависящих от времени амплитуд состояний. При этом мы выводим формулу «золотого правила» и выясняем, как действует закон сохранения энергии, в частности, объясняем, как автоматически учитывается принцип неопределенности в рамках теории возмущений.

Затем мы приступаем к рассмотрению системы нейтральных распадающихся каонов и выводим интересные следствия, вытекающие из одной только исходной предпосылки о том, что существуют нейтральные каоны двух типов, каждый из которых может распадаться на два пиона. Далее мы разясняем аналогию между системой нейтральных каонов и более элементарной системой поляризованных фотонов, рассмотренной в гл. 1, и показываем, как обобщаются квантомеханические концепции когерентности и интерференции состояний. Мы обсуждаем коррелированные распады двух нейтральных каонов в разных местах пространства, что дает интересный поучительный пример проявления парадокса Эйнштейна — Подольского — Розена.

Затем изучаемый процесс распада каонов мы рассматриваем в качестве примера применения более современных временных методов квантовой механики. Мы вычисляем разность масс каонов  $K_1 - K_2$ , появляющуюся во втором порядке теории возмущений, используя современный «интегральный» формализм, который компактнее и удобнее для расчетов поправок высших порядков, чем формализм решения систем дифференциальных уравнений в подходе Гайтлера. (Правда, формализм Гайтлера имеет более ясную физическую интерпретацию.) Мы рассчитываем разность масс каонов, выводя экспоненциальный закон распада и лоренцеву резонансную кривую для спектра энергий пионов распада. Наше рассмотрение позволяет привести простые примеры знаменитых «инфракрасных» и «ультрафиолетовых» расходимостей, имеющих в квантовой теории поля, и объяснить их физическую природу. В заключение мы обсуждаем роль дискретных симметрий, проявляющихся при распаде каонов на примере обсуждения операций четности, зарядового сопряжения и операции обращения времени. Это обсуждение служит элементарным введением к подробному исследованию принципов симметрии и инвариантности в гл. 14.

## Глава 7. РАСПАД КАОНОВ

К-мезон (каон) и  $\pi$ -мезон (пион) относятся к «псевдоскалярным» бозонам, т. е. к частицам, имеющим нулевой спин и отрицательную внутреннюю четность. Масса каона ( $\approx 500$  МэВ) существенно больше массы двух пионов ( $\approx 140$  МэВ у каждого), и поэтому экспериментально наблюдается распад каона на два пиона. Хотя для подробного динамического описания такого процесса распада необходимо использовать релятивистскую квантовую теорию поля, многие интересные его особенности можно выяснить с помощью «феноменологической» теории, в которой применяется формализм вторичного квантования, а не сама теория поля. В феноменологической теории для описания процессов распада каонов строится некоторый модельный «феноменологический» гамильтониан, в котором непосредственно получают отражение основные экспериментальные факты о свойствах свободных каонов и пионов. Используя этот модельный гамильтониан, можно легко изучать процессы распадов с помощью временной теории возмущений.

### § 1. Упрощенная модельная теория с одним зарядовым состоянием

Каоны и пионы имеют по несколько возможных зарядовых состояний: положительные, отрицательные и нейтральные. Вначале, однако, мы не будем рассматривать эти зарядовые состояния, а будем просто считать, что существуют только одного типа каон и одного типа пион. Тогда мы сможем рассматривать вторично квантованные операторы рождения  $a_{Kq}^{\dagger}$  и  $a_{\pi q}^{\dagger}$ , являющиеся операторами рождения каона и пиона соответственно в состоянии с импульсом  $\hbar q$ .

Гамильтониан системы, образованной из невзаимодействующих каонов, в формализме вторичного квантования можно записать следующим образом:

$$H_K = \sum_q E_{Kq} a_{Kq}^{\dagger} a_{Kq}, \quad (7.1)$$

где  $E_{Kq}$  — энергия одного каона с импульсом  $\hbar q$ . Мы считаем, что наша система находится в очень большом ящике, на границах которого каонные волновые функции удовлетворяют периодическим граничным условиям, приводящим к дискретному спектру значений  $q$ . Величины  $E_{Kq}$  мы должны выбрать таким образом, чтобы они описывали экспериментально наблюдаемые свойства каонов. Возьмем релятивистское выражение для полной энергии каона

$$E_{Kq} = [(\hbar q)^2 c^2 + M_K^2 c^4]^{1/2}, \quad (7.2)$$

где  $M_K$  — масса покоя каона, а  $c$  — скорость света. При исследовании процессов, в которых частицы могут рождаться и уничтожаться, мы всегда должны пользоваться релятивистской формулой для энергии, включающей энергию покоя частицы, поскольку последняя явно входит в соотношение, выражающее закон сохранения энергии. Формула (7.2), конечно, выводится в специальной теории относительности. Здесь, однако, мы считаем эту формулу уже известной и используем ее при построении нашего гамильтониана (7.1).

Аналогично можно записать гамильтониан для системы, образованной из невзаимодействующих пионов:

$$H_\pi = \sum_q E_{\pi q} a_{\pi q}^\dagger a_{\pi q}, \quad (7.3)$$

$$E_{\pi q} = [(\hbar q)^2 c^2 + M_\pi^2 c^4]^{1/2}. \quad (7.4)$$

Складывая (7.1) и (7.4), мы получаем *невозмущенный* гамильтониан  $H_0$ , описывающий систему невзаимодействующих каонов и пионов:

$$H_0 = H_K + H_\pi. \quad (7.5)$$

Собственными векторами невозмущенного гамильтониана  $H_0$  являются все возможные состояния, содержащие некоторое число каонов и пионов в состояниях, описываемых плоскими волнами; например, мы можем рассмотреть состояние

$$|K_{q'} K_{q''} \pi_{q'''}\rangle = a_{K_{q'}}^\dagger a_{K_{q''}}^\dagger a_{\pi_{q'''}} |0\rangle. \quad (7.6)$$

Это состояние описывает два каона и один пион, находящиеся в одночастичных состояниях, характеризуемых плоскими волнами, с импульсами  $\hbar q'$ ,  $\hbar q''$  и  $\hbar q'''$  соответственно. Энергия рассматриваемого состояния равна сумме энергий трех этих частиц, так что

$$H_0 |K_{q'} K_{q''} \pi_{q'''}\rangle = (E_{K_{q'}} + E_{K_{q''}} + E_{\pi_{q'''}}) |K_{q'} K_{q''} \pi_{q'''}\rangle. \quad (7.7)$$

В справедливости соотношения (7.7) легко убедиться непосредственно, если воспользоваться коммутационными соотношениями для бозонных операторов рождения и уничтожения.

Итак, мы добились теперь полного описания всех возможных систем, образованных из каонов и пионов; оно будет правильным в том приближении, в котором эти частицы считаются стабильными, т. е. когда пренебрегают их распадами. Мы располагаем гамильтонианом и, следовательно, можем написать уравнение Шредингера. Далее мы можем в явном виде выписать все решения и все собственные значения уравнения Шредингера. Но все это, однако, только «игра с формулами». Здесь нет никакой новой физики. Из такого описания мы можем вывести только те свойства каонов и пионов, которые в него были заложены с самого начала.

Учтем теперь в нашем теоретическом описании системы каонов и пионов возможность распада каонов на пары пионов. При этом сразу воспользуемся феноменологическим подходом, оказавшимся столь плодотворным в настоящее время почти во всех современных приложениях квантовой механики к исследованию новых неизученных задач и проблем (они, как правило, оказываются слишком сложными для того, чтобы их можно было решать, непосредственно исходя из первых принципов). В ядерной и так называемой «субатомной» физике мы вообще не можем построить никаких гамильтонианов, исходя из этих первых принципов (так, как мы его построили в свое время для атома водорода), ибо фундаментальные законы взаимодействий элементарных частиц нам пока что, к сожалению, неизвестны. В большинстве других задач, возникающих, например, в физике твердого тела, полное описание квантовой многочастичной системы, основанное на первых принципах, оказывается очень сложным, громоздким, и практически им невозможно пользоваться, по крайней мере в настоящее время. Во всех подобных случаях мы вынуждены строить упрощенные феноменологические модельные теории так, чтобы с их помощью можно было описать только некоторые заранее отобранные важнейшие факты, например факт существования пионов и каонов с соответствующими массами или же факт наличия распадов каонов на пары пионов. Феноменологический модельный гамильтониан при этом строится *с обязательным учетом всех законов сохранения и всех принципов инвариантности*; в нем нужно учитывать законы сохранения импульса, момента количества движения, электрического заряда, а также соображения релятивистской инвариантности. После того как модельный гамильтониан построен, нужно решить уравнение Шредингера для этого модельного гамильтониана, а также сделать новые выводы и заключения, следующие из развиваемой теории, кроме тех, которые были в нее явно заложены с самого начала при построении гамильтониана.



Всю такую процедуру мы проиллюстрируем ниже на примере теории распада каонов.

Чтобы описать распад какого-то каона, нам нужно иметь такую волновую функцию, которая в начальный момент времени  $t = 0$  описывает «однокаонное» состояние, а в более поздние моменты времени включает также еще и примесь «двухпионной» компоненты. Двухпионная компонента описывает распад каона на два пиона. Для каона с нулевым импульсом в начальном состоянии такая волновая функция имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t) a_{K0}^\dagger |0\rangle + \sum_{q''} \beta_{q''}(t) a_{\pi, -q''}^\dagger a_{\pi q''}^\dagger |0\rangle, \quad (7.8a)$$

где  $\alpha(t)$  и  $\beta_{q''}(t)$  — зависящие от времени коэффициенты, удовлетворяющие следующим начальным условиям:

$$\alpha(0) = 1, \quad (7.8б)$$

$$\beta_{q''}(0) = 0. \quad (7.8в)$$

Добавим теперь к нашему невозмущенному гамильтониану  $H_0$  оператор взаимодействия  $V$ , который будет описывать рассматриваемые процессы распада; иначе говоря, потребуем, чтобы волновая функция (7.8) являлась решением временного уравнения Шредингера с гамильтонианом  $H_0 + V$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle &= i\hbar \frac{\partial \alpha}{\partial t} a_{K0}^\dagger |0\rangle + i\hbar \sum_{q''} \frac{\partial \beta_{q''}}{\partial t} a_{\pi, -q''}^\dagger a_{\pi q''}^\dagger |0\rangle = (H_0 + V) |\psi\rangle = \\ &= E_{K0} \alpha a_{K0}^\dagger |0\rangle + 2 \sum_{q''} E_{Kq''} \beta_{q''} a_{\pi, -q''}^\dagger a_{\pi q''}^\dagger |0\rangle + V |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (7.9)$$

В момент времени  $t = 0$  коэффициенты  $\beta_{q''} = 0$  и в волновой функции нет двухпионной компоненты. Чтобы в последующие моменты времени такая двухпионная компонента могла появиться, у оператора  $V$  должны быть отличные от нуля матричные элементы, связывающие однокаонные и двухпионные состояния, т. е. он должен содержать операторные слагаемые вида

$$a_{\pi q''}^\dagger a_{\pi q''}^\dagger a_{Kq'}, \quad (7.10)$$

описывающие процессы уничтожения каонов и рождения пар пионов. Однако операторное слагаемое вида (7.10) не обладает свойством эрмитовости, которое совершенно необходимо для сохранения квантовомеханической вероятности. Следовательно, если мы включим в  $V$  операторные слагаемые вида (7.10), то должны включить в  $V$  также и эрмитово-сопряженные им слагаемые

$$a_{Kq'}^\dagger a_{\pi q''} a_{\pi q''}. \quad (7.11)$$

Операторные слагаемые (7.11) описывают процессы уничтожения пар пионов и рождения из них каонов. Таким образом, мы видим, что требование сохранения квантовомеханической вероятности обязательно обуславливает учет «обратных» процессов, в которых рождаются каоны из пар пионов; так должно быть в любой теории, описывающей распада каонов на пары пионов. Это следствие квантовой механики есть уже нечто новое, что не было нами заложено в теорию с самого начала.

Дальнейшие ограничения на вид оператора взаимодействия  $V$  вытекают из требования выполнения закона сохранения импульса (или из требования наличия трансляционной инвариантности гамильтониана). Импульс центра масс любых двух рождаемых или уничтожаемых пионов должен всегда равняться импульсу соответствующего каона, из которого они рождаются или в который они превращаются. С учетом этих ограничений мы имеем следующий наиболее общего вида оператор взаимодействия [построенный из операторных членов вида (7.10) и (7.11)]:

$$V = \sum_{q'q''} \{g(q', q'') a_{\pi, q' - q''}^{\dagger} a_{\pi, q'' + q'} a_{K, 2q'} + + g^*(q', q'') a_{K, 2q'} a_{\pi, q' + q''} a_{\pi, q' - q''}\}. \quad (7.12)$$

Здесь  $g(q', q'')$  — некоторая функция от импульса центра масс пары пионов  $2\hbar q'$ , зависящая также от их относительного импульса  $2\hbar q''$ ; эта функция характеризует «силу» взаимодействия, или величину так называемой «константы связи», а также, разумеется, и сам вид зависимости взаимодействия от импульсов. Дальнейшие ограничения на вид функции  $g$  получаются из требований сохранения релятивистской инвариантности и инвариантности относительно пространственных поворотов; полностью вид функции  $g$  определяется заданием «типа» полевой теории, используемой для описания рассматриваемых процессов.

Требованием инвариантности относительно пространственных поворотов мы можем воспользоваться, чтобы найти зависимость функции  $g(0, q'')$  от направления вектора  $q''$ , совпадающего с направлением, по которому излучаются два пиона. При  $q' = 0$  начальный каон находится в покое и обладает нулевым моментом количества движения. Следовательно, его начальное состояние инвариантно относительно пространственных поворотов, и поэтому функция  $g(0, q'')$  не зависит от направления вектора  $q''$ .

Требование релятивистской инвариантности позволяет найти зависимость функции  $g(q', q'')$  от  $q'$ . Изменяя  $q'$ , мы изменяем импульс каона, т. е. скорость движения каона относительно выбранной системы отсчета. Таким образом, результат произвольного изменения импульса  $q'$  можно описать с помощью соответствующего преобразования Лоренца. Действительно, если извест-

но значение функции  $g(q', q'')$  для какого-то одного значения  $q'$  [например, если известно  $g(0, q'')$ ], то с помощью преобразования Лоренца можно получить значения функции  $g(q', q'')$  для любых значений  $q'$ . Неизвестной остается только зависимость функции  $g(0, q'')$  от модуля вектора  $q''$ .

Полностью зависимость функции  $g(q', q'')$  от  $q', q''$  можно определить, если задаться определенной формой полевой теории. Рассмотрим, например, к чему приводит дополнительное условие, что взаимодействие является «локальным», т. е. два пиона рождаются точно в той же точке конфигурационного пространства, в которой исчезает каон. Это условие можно очень просто выразить, записав взаимодействие через операторы рождения  $a^\dagger(x)$ , рождающие частицы в точке  $x$  конфигурационного пространства. Оператор взаимодействия тогда принимает следующий вид:

$$V = g \int dx a_\pi^\dagger(x) a_\pi^\dagger(x) a_K(x) + \text{эрмит. сопр.}, \quad (7.13a)$$

где  $g$  — некоторая постоянная, а слова «эрмит. сопр.» означают, что надо добавить эрмитово-сопряженное выражение. Никакой особой зависимости взаимодействия от  $x$  учитывать не нужно, так как все точки конфигурационного пространства эквивалентны друг другу. Оператор локального взаимодействия (7.13a) можно, конечно, выразить также и через операторы рождения и уничтожения частиц в импульсных одночастичных состояниях, если записать каждый из трех операторов, имеющих в (7.13a), как фурье-образ. Тогда получим

$$V = g' \int dx \sum_{q^* q'' q'''} e^{-iq^* \cdot x} e^{-iq'' \cdot x} e^{iq''' \cdot x} a_{\pi q^*}^\dagger a_{\pi q''}^\dagger a_{K q'''} + \text{эрмит. сопр.} \quad (7.13б)$$

Здесь  $g'$  означает произведение постоянной  $g$  и различных нормировочных множителей, имеющих в формулах преобразования Фурье. Интегрирование по  $x$  в (7.13б) легко выполнить; оно приводит к появлению  $\delta$ -функции, выражающей закон сохранения импульса. Так мы получаем

$$V = g'' \sum_{q' q''} a_{\pi q'}^\dagger a_{\pi q''}^\dagger a_{K, q'+q''} + \text{эрмит. сопр.}, \quad (7.13в)$$

где  $g''$  — еще одна новая постоянная. Сравнив оператор локального взаимодействия (7.13в) с оператором взаимодействия общего вида (7.12), находим, что требование локальности взаимодействия попросту означает, что функция  $g(q', q'')$  есть некоторая постоянная величина, не зависящая ни от  $q'$ , ни от  $q''$ .

Хотя при построении оператора взаимодействия (7.12) мы специально учли требования закона сохранения импульса, однако совсем не приняли во внимание требований закона сохранения

энергии. Импульсы двух пионов, рождающихся при распаде каона с импульсом  $2\hbar q'$ , конечно, совершенно однозначно находятся из законов сохранения энергии и импульса. Отсюда, казалось бы, можно сделать вывод, что оператор  $V$  должен содержать только операторные члены, для которых значения относительного импульса пионов разрешены законами сохранения импульса и энергии. Однако такое заключение ошибочно. Дело в том, что говорить о вполне определенной энергии системы можно только в том случае, когда система находится в состоянии, являющемся собственным состоянием ее полного гамильтониана, включающего не только  $H_0$ , но также и оператор взаимодействия  $V$ . Ниже мы будем изучать, однако, не эти состояния, которые являются собственными состояниями полного гамильтониана, или стационарными состояниями, а совсем другие состояния, которые являются решениями временного уравнения Шредингера и описывают в начальный момент времени один каон и в конечный момент — два пиона. Так как каждое такое состояние является собственным состоянием оператора импульса, то мы можем (и должны) использовать закон сохранения импульса. Однако это состояние не есть собственное состояние оператора полной энергии системы. Более того, нам вообще известны только невозмущенные энергии и вовсе не известны точные энергии, которые суть собственные значения полного гамильтониана, включающего  $H_0$  и оператор взаимодействия  $V$ . Следовательно, мы не должны с самого начала использовать закон сохранения энергии при составлении выражения для нашего оператора взаимодействия (7.13). Ниже мы увидим, что закон сохранения энергии будет выполняться сам собой в вычислениях.

У читателя может сложиться превратное впечатление, что здесь мы входим в противоречие с основными принципами специальной теории относительности, так как рассматриваем энергию и импульс совершенно по-разному. Это неверно, потому что мы всегда можем для нашей задачи развить полностью ковариантную формулировку, в которой энергия и импульс будут фигурировать абсолютно равноправно, но в этом нет необходимости. Конечно, законы природы инвариантны относительно преобразований Лоренца, однако наши эксперименты всегда ставятся в какой-то конкретной системе отсчета, поэтому нам удобно выбрать такой способ построения теории, который был бы пригоден именно для данной системы отсчета, хотя он и представляется, может быть, очень сложным наблюдателю из другой системы отсчета. Когда мы говорим, что состояние (7.8) в начальный момент времени  $t = 0$  отвечает каону, то тем самым мы уже выбираем определенную лоренцеву систему отсчета. В других лоренцевых системах отсчета это начальное состояние будет задаваться не в один какой-то фиксированный момент времени, а в различные моменты для разных точек пространства, в которых, по нашему предположению,

может находиться начальный каон. Поскольку самим выбором начального состояния мы уже нарушили симметрию между пространством и временем, то тем самым, естественно, нарушили также и симметрию энергии и импульса.

## § 2. Применение временной теории возмущений в упрощенной модельной теории

Используя теперь оператор взаимодействия (7.12) во временном уравнении Шредингера (7.9), мы постараемся найти решение этого уравнения. При действии оператора (7.12) на состояние (7.8а) ненулевой результат дают только члены в (7.12) с  $q' = 0$ , потому что все остальные члены в сумме в (7.12) имеют обязательно хотя бы по одному такому оператору уничтожения, который коммутирует со всеми операторами рождения, входящими в выражение для волновой функции (7.8). Каждый такой оператор уничтожения можно перенести направо, переставляя его по очереди с операторами рождения, после чего он подействует непосредственно на вакуумное состояние и даст нуль. Таким образом, имеем

$$V|\psi\rangle = \sum_{q''} g(0, q'') \alpha a_{\pi}^{\dagger} - q'' a_{\pi q''}^{\dagger} |0\rangle + \sum_{q''} g^*(0, q'') \beta_{q''} a_{K_0}^{\dagger} |0\rangle. \quad (7.14)$$

Подставляя (7.14) в уравнение (7.9) и приравнивая друг к другу коэффициенты при каждом соответствующем состоянии, получаем

$$i\hbar \frac{\partial \alpha}{\partial t} = E_{K_0} \alpha + \sum_{q''} g^*(0, q'') \beta_{q''}, \quad (7.15a)$$

$$i\hbar \frac{\partial \beta_{q''}}{\partial t} = 2E_{\pi q} \beta_{q''} + g(0, q'') \alpha. \quad (7.15b)$$

Формальное интегрирование этих уравнений с учетом начальных условий (7.8б) и (7.8в) дает

$$\alpha e^{iE_{K_0} t/\hbar} - 1 = -\frac{i}{\hbar} \sum_{q''} g^*(0, q'') \int_0^t dt' \beta_{q''}(t') e^{iE_{K_0} t'/\hbar}, \quad (7.15в)$$

$$\beta_{q''} e^{2iE_{\pi q} t/\hbar} = -\frac{i}{\hbar} g(0, q'') \int_0^t dt' \alpha(t') e^{2iE_{\pi q} t'/\hbar}. \quad (7.15г)$$

Предположим теперь, что  $V$  мало и может рассматриваться как *возмущение*. Тогда для достаточно малых значений  $t$  коэффициенты  $\beta_{q''}$  будут тоже малыми и уравнения (7.15) легко можно будет разрешить в первом приближении по этим малым величинам. Пра-

вая часть уравнения (7.15в) имеет второй порядок малости, и мы ею пренебрегаем, так что имеем

$$\alpha = e^{-iE_{K_0}t/\hbar}. \quad (7.16a)$$

Подставляя теперь (7.16a) в уравнение (7.15г) и проводя интегрирование, находим

$$\beta_{q''} = g(0, q'') \left\{ \frac{e^{-i(E_{K_0} - 2E_{\pi q''})t/\hbar} - 1}{E_{K_0} - 2E_{\pi q''}} \right\} e^{-2iE_{\pi q''}t/\hbar}. \quad (7.16б)$$

Эти полученные в *первом* приближении формулы справедливы лишь для небольших промежутков времени, малых по сравнению со средним временем жизни каона, или временем его распада, так как из формулы (7.16a) видно, что абсолютная величина  $\alpha$  никак не меняется со временем. Это означает, что мы пренебрегаем в рассматриваемом приближении уменьшением вероятности пребывания каона в его начальном состоянии из-за его распада. Однако для того, чтобы найти вероятность обнаружить систему в различных двухпионных состояниях с импульсами  $q''$  и  $-q''$  спустя короткий промежуток времени  $t$ , этого приближения достаточно:

$$|\beta_{q''}|^2 = \frac{4|g(0, q'')|^2}{(E_{K_0} - 2E_{\pi q''})^2} \sin^2 \{(E_{K_0} - 2E_{\pi q''})t/2\hbar\}. \quad (7.17)$$

Вид формулы (7.17) исключительно любопытен; она показывает, какую форму во временной теории возмущений с *независящим* от времени возмущением принимает закон сохранения энергии, который выполняется с точностью, допускаемой соотношением неопределенности. Полученная нами зависящая от времени волновая функция содержит компоненты, в которых значения импульсов пионов таковы, что не согласуются с законом сохранения энергии. Однако амплитуды этих состояний не увеличиваются со временем, а изменяются периодически, оставаясь все время малыми. Растут со временем амплитуды только тех состояний, для которых значения  $q''$  удовлетворяют закону сохранения энергии, т. е. для которых  $2E_{\pi q''} = E_{K_0}$ . Разумеется, для тех компонент волновой функции, для которых энергия приближенно сохраняется с большой степенью точности, периоды указанных колебаний оказываются очень большими. Эти компоненты монотонно возрастают со временем в первой четверти периода. Таким образом, для любого момента времени  $t$  всегда найдутся такие компоненты в нашей волновой функции, для которых энергия не сохраняется в точности, но которые тем не менее все равно растут; это компоненты, удовлетворяющие условию

$$(E_{K_0} - 2E_{\pi q''})t/2\hbar < \frac{1}{2}\pi. \quad (7.18a)$$

Следовательно, энергия двухпионного состояния не вполне определена, хотя ширина разброса по энергиям и уменьшается с течением времени. По порядку величины эту ширину можно оценить с помощью формулы (7.18а); она равна

$$\Delta E_{\pi} \approx \hbar/t. \quad (7.18б)$$

Это как раз тот разброс энергий, который следует из соотношения неопределенности.

Полную вероятность того, что каон к моменту времени  $t$  распадется на два пиона, можно найти, просуммировав выражение (7.17) по всем значениям  $q''$ . Если считать, что наша система заключена в ящике очень больших размеров, то сумму можно заменить интегралом; в результате получим

$$\sum_{q''} |\beta_{q''}|^2 = \int |\beta_{q''}|^2 \rho(E_f) dE_f. \quad (7.19а)$$

Здесь  $\rho(E_f)$  — плотность конечных состояний, приходящихся на единичный интервал энергий  $E_f$ , причем  $E_f = 2E_{\pi q''}$ . В интеграле (7.19а) вносит заметный вклад только очень узкий интервал энергий  $E_f$ . Если считать, что  $g(0, q'')$  и  $\rho(E_f)$  довольно плавно меняются в указанном интервале, то эти величины можно просто заменить на их значения при энергии  $E_f = E_{K0}$ , при которой в точности выполняется закон сохранения энергии. Обозначив эти величины через  $g(0, q_K)$  и  $\rho(E_{K0})$ , мы можем вынести их из-под знака интеграла. Подставляя (7.17) в (7.19а), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{q''} |\beta_{q''}|^2 &= 4 |g(0, q_K)|^2 \rho(E_{K0}) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{t}{2\hbar} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |g(0, q_K)|^2 \rho(E_{K0}) t; \end{aligned} \quad (7.19б)$$

здесь

$$x = (E_{K0} - 2E_{\pi q''}) t / 2\hbar = (E_{K0} - E_f) t / 2\hbar. \quad (7.19в)$$

Из формул (7.19) непосредственно видно, что полная вероятность исследуемого перехода прямо пропорциональна времени  $t$ , что, конечно, следовало ожидать заранее, поскольку мы рассматриваем небольшой начальный интервал времени, в течение которого полностью пренебрегаем распадом начального состояния. (Более правильное приближение, которое мы рассмотрим ниже, позволит описать ожидаемый экспоненциальный распад этого состояния.) Для вероятности перехода в единицу времени из (7.19в) имеем выражение

$$W_{K \rightarrow 2\pi} = \frac{2\pi}{\hbar} |g(0, q_K)|^2 \rho(E_{K0}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \rho(E_f), \quad (7.20)$$

в котором  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$  означают конечное и начальное состояния нашей системы. Матричный элемент оператора  $V$ , взятый между этими состояниями, как раз равен  $g(0, q_K)$ .

Формула (7.20) — основная в квантовой теории процессов излучения и распада; она носит название «золотого правила». Согласно формуле (7.20), *вероятность перехода из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|f\rangle$  в единицу времени пропорциональна квадрату матричного элемента оператора возмущения, взятого между этими состояниями* (вообще говоря, зависящего от импульса рождаемой или поглощаемой частицы), *и элементу фазового объема, который является просто энергетической плотностью конечных состояний системы, т. е. числом состояний, приходящихся на единичный интервал энергии.* Мы сможем легко вычислить эту энергетическую плотность, если учтем, что плотность конечных состояний в импульсном пространстве определяется формулой

$$\rho(p) dp = \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} \Omega, \quad (7.21)$$

справедливой для системы, заключенной в ящик объема  $\Omega$ . Плотность конечных состояний для двухпионной системы можно найти с помощью формулы (7.21) и результат подставить в формулу (7.20). Нам не следует удивляться тому, что в окончательно получаемую формулу будет входить объем ящика  $\Omega$ , хотя по здравому смыслу скорость распада первоначально покоившегося каона не может зависеть от размеров ящика, в котором заключена наша система. В формуле (7.20) есть еще один неявный множитель, содержащий объем  $\Omega$ : он входит в матричный элемент оператора взаимодействия, так как в последний при вычислении нужно подставить волновые функции в виде плоских волн, нормированных на ящик объема  $\Omega$ . Поэтому квадрат матричного элемента оператора  $V$  в формуле (7.20) содержит множитель  $1/\Omega$ , который сокращается с множителем  $\Omega$ , происходящим от фазового объема, т. е. имеющимся в  $\rho(E_f)$ .

Обсудим теперь, насколько законно наше допущение о том, что величина  $g(0, q'')$  *медленно изменяется* в узком интервале значений энергии  $E_f$ , который вносит основной вклад в интеграл в формуле (7.19а), и что ее можно поэтому вынести из-под знака интеграла. Для локального взаимодействия вида (7.13) величина  $g(0, q'')$  строго не зависит от  $q''$ , и ее можно вынести из-под знака интеграла, не делая никаких допущений. Это означает, что взаимодействие двух пионов, проявляющихся в конечном состоянии, имеет «нулевой радиус», т. е. они ведут себя как совершенно свободные частицы, если только оба одновременно не оказываются в одной и той же точке пространства.

Предположим теперь обратное: взаимодействие распространяется на конечные расстояния; иначе говоря, будем считать, что



два пиона могут превратиться в каон, находясь на конечном малом расстоянии друг от друга, которое мы обозначим через  $\Delta x$ . Тогда величина  $g(0, q'')$  уже не будет постоянной, не зависящей от  $q''$ , а будет фурье-образом функции, характеризующей размазанность взаимодействия в конфигурационном пространстве. Для очень больших значений  $q''$ , когда в области взаимодействия укладывается большое число длин волн, вклады от отдельных частей этой области в интеграл для фурье-образа взаимно компенсируются, а, следовательно, величина  $g(0, q'')$  становится очень малой. Таким образом, величину  $g(0, q'')$  можно действительно считать постоянной при малых значениях  $q''$ , меньших  $1/\Delta x$ ; при таких значениях  $q''$  длина волны больше размеров области взаимодействия; при больших значениях  $q''$  длина волны быстро уменьшается до нуля.

Итак, можно считать, что величина  $g(0, q'')$  постоянна внутри интервала интегрирования  $\Delta q''$  в формуле (7.19а), если только  $\Delta q'' \ll 1/\Delta x$ . Так как  $\hbar q''$  — импульс пиона, который мы обозначаем  $p_\pi$ , последнее условие можно переписать:

$$\Delta x \ll \frac{\hbar}{\Delta p_\pi} = \frac{\hbar v_\pi}{\Delta E_\pi} \approx v_\pi t. \quad (7.22)$$

Здесь мы воспользовались известным соотношением, которое имеется между энергией  $E_\pi$ , скоростью  $v_\pi$  и импульсом  $p_\pi$  пиона, а также использовали соотношение неопределенности (7.18б), связывающее время с разбросом энергии. Условие (7.22) означает, что должен протечь достаточно большой промежуток времени, чтобы пионы могли разлететься друг от друга на расстояние, большее размеров области взаимодействия.

### § 3. Распады нейтральных каонов

Экспериментально известны четыре типа каонов и три типа пионов. Существуют положительно и отрицательно заряженные каоны и два типа нейтральных каонов, в то же время имеются положительно и отрицательно заряженные пионы и один тип нейтральных пионов. Распады электрически заряженных каонов на заряженные и нейтральные пионы достаточно полно описываются простой модельной теорией, которая была развита в предыдущем параграфе, но в которой о зарядовых состояниях каонов и пионов мы ничего не говорили. Необходимо теперь ввести в индекс операторов рождения и уничтожения пионов и каонов и потребовать, чтобы наш феноменологический гамильтониан удовлетворял закону сохранения электрического заряда. Распады нейтральных каонов нужно описывать, однако, совсем по-другому, причем здесь мы сталкиваемся с дополнительными интересными, хотя и вызываю-

щами затруднения, особенностями, потому что в природе существуют два разных состояния нейтрального каона.

Эти нейтральные каоны обычно обозначают  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ . Заряд, масса, спин и четность у этих частиц одинаковы, и они отличаются друг от друга только тем, как рождаются при сильных взаимодействиях. Эти каоны характеризуются особым квантовым числом, которое называется «странностью»; оно сохраняется в сильных взаимодействиях. Каоны  $K^0$  и  $K^+$  имеют странность  $S = +1$ ; каоны  $\bar{K}^0$  и  $K^-$  имеют странность  $S = -1$ . Все пионы имеют странность  $S = 0$ . Странность сохраняется в сильных взаимодействиях и не сохраняется в слабых взаимодействиях, главным образом ответственных за распады каонов. Действительно, закон сохранения странности совершенно недвусмысленно нарушается при распаде каона на два пиона, каждый из которых имеет странность  $S = 0$ .

Итак, рассмотрим распады нейтральных каонов на пары пионов. При этом мы не будем учитывать различных зарядовых состояний пионов (нейтральный каон может распадаться либо на два нейтральных пиона, либо на пионы  $\pi^+$  и  $\pi^-$ ). Учтем, однако, что существуют два состояния нейтрального каона  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ .

Сначала постараемся обобщить форму оператора взаимодействия  $V$  [см. (7.12)] на случай возможных распадов нейтральных каонов обоих типов. Ради простоты рассмотрим распад *покоящегося* каона, а также не будем явно выписывать индексы импульсов пионов, возникающих при распаде. Для нас существенны, конечно, только те значения импульсов пионов, при которых энергия каона сохраняется с необходимой степенью приближения. Импульсы и закон сохранения энергии можно учесть точно так же, как в упрощенной модельной теории, в которой, однако, не принимались во внимание зарядовые состояния частиц. Таким образом, мы рассмотрим только простой оператор взаимодействия вида

$$g a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K} + g^* a_{K}^{\dagger} a_{\pi} a_{\pi}; \quad (7.23)$$

здесь индексы импульсных переменных опущены. Естественным обобщением этого оператора взаимодействия на случай возможных распадов каонов обоих типов будет оператор

$$V = g_1 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + g_2 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + g_1^* a_{K^0}^{\dagger} a_{\pi} a_{\pi} + g_2^* a_{\bar{K}^0}^{\dagger} a_{\pi} a_{\pi}. \quad (7.24)$$

Здесь  $a_{K^0}^{\dagger}$  и  $a_{\bar{K}^0}^{\dagger}$  — операторы рождения каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  соответственно, причем мы ввели две константы связи  $g_1$  и  $g_2$ , характеризующие процессы распадов.

Можно, конечно, было бы попытаться применить к взаимодействию (7.24) временную теорию возмущений, т. е. поступить точно так же, как в упрощенной модельной теории. Тогда мы пришли бы

к заключению, что вероятность распада каона  $K^0$  определяется константой связи  $g_1$ , а вероятность распада каона  $\bar{K}^0$  — константой связи  $g_2$ . Однако это был бы неправильный вывод, так как  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  — два вырожденных по массе состояния, т. е. они сильно перемешиваются возмущением  $V$ , которое может, например, сначала привести к распаду каона  $K^0$  на два пиона, а затем к образованию из этих пионов каона  $\bar{K}^0$ . Следовательно, могут возникнуть такие состояния каона, когда каон нельзя будет охарактеризовать ни как каон  $K^0$ , ни как каон  $\bar{K}^0$ , а можно будет описать только их линейной комбинацией. В простой невременной теории возмущений каоны  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  рассматриваются независимо, т. е. пренебрегается вырождением их по массе и смешиванием состояний. В полной теории возмущений нужно обязательно воспользоваться формулами этой теории при наличии вырождения, т. е. выбрать правильные «нулевые» линейные комбинации каонных состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , которые диагонализуют оператор возмущения.

Рассмотрим две следующие линейные комбинации:

$$a_{K_1}^\dagger = (|g_1^2| + |g_2^2|)^{-\frac{1}{2}} \{g_1 a_{K^0}^\dagger + g_2 a_{\bar{K}^0}^\dagger\}, \quad (7.25a)$$

$$a_{K_2}^\dagger = (|g_1^2| + |g_2^2|)^{-\frac{1}{2}} \{g_2 a_{K^0}^\dagger - g_1 a_{\bar{K}^0}^\dagger\}; \quad (7.25b)$$

подействуем оператором  $V$  на каонное состояние, описываемое линейной комбинацией  $K_2$ , даваемой формулой (7.25b). Получим

$$V a_{K_2}^\dagger |0\rangle = \frac{g_1 g_2}{(|g_1^2| + |g_2^2|)^{\frac{1}{2}}} a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger |0\rangle - \frac{g_2 g_1}{(|g_1^2| + |g_2^2|)^{\frac{1}{2}}} a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger |0\rangle = 0, \quad (7.26a)$$

откуда имеем

$$H a_{K_2}^\dagger |0\rangle = (H_0 + V) a_{K_2}^\dagger |0\rangle = H_0 a_{K_2}^\dagger |0\rangle = E_{K_0} a_{K_2}^\dagger |0\rangle. \quad (7.26b)$$

Таким образом, состояние  $K_2$  является собственным состоянием как невозмущенного, так и возмущенного гамильтонианов и, следовательно, вообще не распадается, если процесс распада описывается оператором взаимодействия (7.24).

Итак, взаимодействие (7.24) правильнее записывать через линейные комбинации  $K_1$  и  $K_2$ , определенные формулами (7.25a) и (7.25b), а не через состояния  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , хотя они и являются собственными для квантового числа странности, т. е. в виде

$$V = g a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger a_{K_1} + g^* a_{K_1}^\dagger a_\pi a_\pi, \quad (7.27a)$$

где

$$g = (|g_1^2| + |g_2^2|)^{\frac{1}{2}}. \quad (7.27b)$$

Это взаимодействие описывает распад нейтрального каона, находящегося в состоянии  $K_1$ , на два пиона с константой связи  $g$ , причем в (7.27а) явным образом учтено, что другая, ортогональная  $K_1$  линейная комбинация  $K_2$ , совсем не распадается.

Экспериментально сначала было установлено, что на два пиона распадается действительно только одна из двух независимых линейных комбинаций, составленных из  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , а другая, ортогональная ей линейная комбинация не распадается на два пиона. Было обнаружено, что последняя распадается на три пиона или большее их число, причем время ее жизни относительно этих многочастичных распадов оказалось очень большим. Позже экспериментально было найдено, что «долгоживущий» каон, распадающийся на три пиона, тоже может распадаться на два пиона, правда, с ничтожно малой вероятностью. Этот экспериментальный факт вызвал в свое время огромную сенсацию, потому что послужил доказательством нарушения так называемой  $CP$ -инвариантности при распадах каонов. В этом параграфе мы, однако, пренебрежем слабым нарушением  $CP$ -инвариантности; вытекающие из нее следствия мы обсудим позже в § 8 и 11 настоящей главы.

Разбираемая нами здесь теория распадов нейтральных каонов служит прекрасным примером современных применений квантовой механики к решению выдвигаемых экспериментом задач. Сначала мы построили феноменологический гамилтониан, потребовав, чтобы в нем учитывались распады нейтральных каонов двух типов на пары пионов, а также известные экспериментально свойства свободных каонов и пионов, т. е. правильные, релятивистские соотношения между энергией и импульсом для каонов и пионов. После этого мы обнаружили, что из развиваемой квантовомеханической теории вытекает нечто новое, что не было заложено в нее с самого начала, а именно что одна определенная линейная комбинация каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  может, а другая не может распадаться на два пиона.

Это новое заключение является непосредственным следствием двух основных принципов квантовой механики: 1) вероятности процессов в квантовой механике выражаются через квадраты амплитуд; 2) имеет место принцип суперпозиции квантовых состояний. Если система находилась первоначально в состоянии, которое мы называем  $K^0$ , тогда вероятность того, что за время  $t$  она распадется на два пиона, описывается комплексной амплитудой  $A(t)$ , квадрат которой как раз и дает вероятность обнаружить нашу систему в двухпионном состоянии в момент времени  $t$ . Если же система первоначально находилась в состоянии, которое мы называем  $\bar{K}^0$ , тогда вероятность того, что за время  $t$  она распадется на два пиона, будет описываться другой комплексной амплитудой  $\bar{A}(t)$ , квадрат которой дает вероятность обнаружить рас-

смагриваемую систему в двухпионном состоянии в момент времени  $t$ . А priori амплитуды  $A(t)$  и  $\bar{A}(t)$  никак не связаны между собой. Принцип суперпозиции, однако, говорит нам, что если система находилась первоначально в состоянии, представляющем собой линейную комбинацию состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , то амплитуда вероятности ее двухпионного распада к моменту времени  $t$  описывается соответствующей линейной комбинацией обеих амплитуд  $A(t)$  и  $\bar{A}(t)$ . Вероятность распада каона просто равна квадрату линейной комбинации этих амплитуд:

$$P\{|xK^0 + y\bar{K}^0\rangle \rightarrow |2\pi\rangle\} = |xA + y\bar{A}|^2. \quad (7.28)$$

Таким образом, для любых заданных амплитуд  $A$  и  $\bar{A}$  всегда существует определенная линейная комбинация состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , для которой амплитуда вероятности двухпионного распада обращается строго в нуль. Следовательно, мы всегда можем указать такую линейную комбинацию состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , для которой вероятность двухпионного распада спустя очень большое время  $t$  будет равна нулю, т. е. эта линейная комбинация состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  не будет распадаться на два пиона.

Рассматриваемая теория поучительна в том отношении, что дает замечательный пример эффекта квантовой интерференции. В уравнении Шредингера для одной частицы явления усиления и ослабления волн при квантовой интерференции проявляются особенно наглядно. Волны, приходящие в данную точку пространства по различным путям, складываются с учетом соответствующих фазовых множителей, зависящих от разности хода. Использование комплексных чисел для описания амплитуд этих волн оказывается удобным математическим приемом, позволяющим легко следить за фазами волн. В многочастичных задачах или в задачах, аналогичных рассматриваемой задаче распада каона, когда частицы могут рождаться и уничтожаться, эта простая трехмерная картина интерференции волн теряет всякую наглядность. Квантовую многочастичную систему нельзя, конечно, представлять себе так, что в ней каждая частица описывается своей волной, а эти волны затем погашают или усиливают друг друга при интерференции. Различные квантовые пути, по которым происходит переход системы из одного состояния в другое, здесь уже нельзя никак связать с различными путями распространения волн в трехмерном пространстве. Квантовые пути надо, по-видимому, мыслить в каком-то другом пространстве. Тем не менее даже и для таких сложных систем все же используют комплексные амплитуды для описания вероятностей различных процессов, идущих по различным «путям» (скажем, по  $K^0$ - или по  $\bar{K}^0$ -пути, как в разобранным выше примере). Эти сложные амплитуды скла-

дываются и тоже могут интерферировать с взаимным усилением или ослаблением аналогично волнам в трехмерном пространстве. Вероятность данного квантового процесса при этом дается квадратом суммарной амплитуды.

#### § 4. Нейтральные каоны и поляризованные фотоны

Поведение нейтральных каонов напоминает поведение поляризованных фотонов при прохождении последних через призмы Николя, ориентированные под различными углами. Если пучок поляризованного света пропустить через призму Николя, ориентированную горизонтально или вертикально, то состояние падающего фотона удобно описывать линейной комбинацией компонент, поляризованных в горизонтальном и вертикальном направлениях, потому что одна из компонент проходит через призму, а другая не проходит через нее. Предположим теперь, что после прохождения через такую призму пучок поляризованных фотонов попадает на другую призму Николя, ориентированную под углом  $45^\circ$  к вертикали. Здесь уже удобно рассматривать состояние фотона как линейную комбинацию компонент, поляризованных под углами  $\pm 45^\circ$ , так как одна из *этих* компонент проходит через призму, а другая — нет.

Рассмотрим, наконец, пучок поляризованных фотонов, который последовательно проходит через три призмы Николя, ориентированные соответственно горизонтально, под углом  $45^\circ$  и вертикально. Компонента пучка, поляризованная в вертикальном направлении, сначала удаляется из него первой призмой, но затем восстанавливается при последующем прохождении пучка через вторую призму, ориентированную под углом  $45^\circ$ . Таким образом, в пучке остается компонента, поляризованная вертикально, которая полностью пропускается третьей, вертикально ориентированной призмой.

Совершенно аналогично обстоит дело с двумя возможными ортогональными наборами линейных комбинаций состояний нейтральных каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , которые удобны для описания сильных взаимодействий, или нейтральных каонов  $K_1$  и  $K_2$ , которые удобны для описания слабых взаимодействий. Пучок каонов  $K^0$  очень быстро превращается в пучок каонов  $K_2$ , так как каоны  $K_1$  в нем за короткое время полностью распадаются на пары пионов. Каоны  $K_2$  не могут распасться на пары пионов, и время их жизни относительно распадов на три пиона настолько велико, что этими распадами можно вообще полностью пренебречь. Если теперь полученный пучок каонов  $K_2$  пропустить через слой какого-либо вещества, то пучок будет испытывать сильное взаимодей-

ствие с нуклонами вещества, причем для описания последнего удобно вновь перейти к линейным комбинациям нейтральных каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , так как каоны  $\bar{K}^0$  поглощаются веществом сильнее, чем каоны  $K^0$ , и на выходе из вещества у нас остается пучок каонов  $K^0$ . В этом новом пучке каоны  $K_1$  опять очень быстро распадаются, и у нас вновь остается пучок каонов  $K_2$  и т. д.

Таким образом, мы видим, что базис  $K^0, \bar{K}^0$  удобен для описания пучка каонов, проходящего через слой вещества, в котором пучок поглощается в результате сильных взаимодействий, а базис  $K_1, K_2$  удобен для описания пучка, проходящего через свободное пространство, в котором он распадается в результате слабых взаимодействий. Мы имеем полную аналогию с поляризованными фотонами, для которых горизонтально-вертикальный базис удобен для описания прохождения через горизонтально или вертикально ориентированные призмы, а базис с поляризациями под углами  $\pm 45^\circ$  удобен для описания прохождения через призмы, ориентированные под углами  $\pm 45^\circ$ . Мы отмечали выше, что в пучке чистых каонов  $K_2$  могут появляться каоны  $K_1$ , причем без какого бы то ни было добавления новых частиц в этот пучок, а просто за счет поглощения каонов  $\bar{K}^0$  при прохождении каонов  $K_2$  через слой вещества. Аналогичным образом в пучке полностью горизонтально поляризованного света может появиться компонента, поляризованная в вертикальном направлении и образующаяся за счет поглощения в призме компоненты, поляризованной под углом  $45^\circ$ .

Все эти взаимосвязи можно выразить формально, вводя в рассмотрение оператор  $S$  для квантового числа странности, которая сохраняется в сильных взаимодействиях, и оператор  $CP$ -четности, которая сохраняется в слабых взаимодействиях (при условии, что мы пренебрегаем нарушениями  $CP$ -четности). Действие этих операторов на состояния нейтральных каонов описывается соотношениями

$$Sa_{K^0}^\dagger | 0 \rangle = +a_{K^0}^\dagger | 0 \rangle, \quad (7.29a)$$

$$Sa_{\bar{K}^0}^\dagger | 0 \rangle = -a_{\bar{K}^0}^\dagger | 0 \rangle, \quad (7.29б)$$

$$CPa_{K^0}^\dagger | 0 \rangle = -a_{\bar{K}^0}^\dagger | 0 \rangle, \quad (7.29в)$$

$$CPa_{\bar{K}^0}^\dagger | 0 \rangle = -a_{K^0}^\dagger | 0 \rangle. \quad (7.29г)$$

Ниже будет показано, что  $CP$ -четность сохраняется при взаимодействии (7.24), если  $g_1 = -g_2$ . В этом случае соотношения (7.25)

принимают вид

$$a_{K_1}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \{a_{K^0}^\dagger - a_{\bar{K}^0}^\dagger\}, \quad (7.30a)$$

$$a_{K_2}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \{a_{K^0}^\dagger + a_{\bar{K}^0}^\dagger\}. \quad (7.30b)$$

Из (7.30a) и (7.30b) с учетом (7.29a) — (7.29г) получаем

$$S a_{K_1}^\dagger |0\rangle = a_{K_2}^\dagger |0\rangle, \quad (7.31a)$$

$$S a_{K_2}^\dagger |0\rangle = a_{K_1}^\dagger |0\rangle, \quad (7.31b)$$

$$CP a_{K_1}^\dagger |0\rangle = + a_{K_1}^\dagger |0\rangle, \quad (7.31в)$$

$$CP a_{K_2}^\dagger |0\rangle = - a_{K_2}^\dagger |0\rangle. \quad (7.31г)$$

Состояния  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  являются собственными состояниями для оператора  $S$ , а состояния  $K_1$ ,  $K_2$  — собственными состояниями для оператора  $CP$ . Двухпионное состояние, образующееся при распаде каона, должно быть собственным состоянием оператора  $CP$  с собственным значением, равным  $+1$ . Таким образом, мы видим, что если сделать предположение о сохранении  $CP$ -четности в слабых взаимодействиях, то каон  $K_1$  может распадаться на два пиона, а каон  $K_2$  — нет.

### § 5. Система из двух нейтральных каонов

Два каона могут родиться одновременно либо при взаимодействии каких-то элементарных частиц (например при аннигиляции пары протон — антипротон), либо при распаде некоторых нестабильных мезонных резонансов (например  $\phi$ -мезона). Система из двух нейтральных каонов физически интересна тем, что эти каоны рождаются при сильных взаимодействиях в состояниях  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , а распадаются при слабых взаимодействиях в состояниях  $K_1$  и  $K_2$ . Эта особенность двухкаонной системы позволяет на основании имеющихся экспериментов сделать определенные заключения о свойствах квантового состояния элементарной частицы, которая распалась на два каона.

Рассмотрим систему из двух каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , образовавшуюся, например, при распаде сильно взаимодействующей частицы с нулевой странностью. Если импульс центра масс пары родившихся каонов равен нулю, то мы можем записать состояние этой пары каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  в виде

$$|\psi\rangle = \sum_q f(q) a_{K^0 q}^\dagger a_{\bar{K}^0, -q}^\dagger |0\rangle, \quad (7.32)$$



где  $f(q)$  — некоторая функция относительного импульса  $2q$ . Если рассматриваемая двухкаонная система образовалась при распаде элементарной частицы, масса которой точно известна, то абсолютную величину импульса  $q$  можно найти из закона сохранения энергии (с неопределенностью, задаваемой естественной шириной уровня распадающейся частицы). Разброс направлений импульса  $q$  определяется величиной квантового числа момента количества движения состояния начальной частицы, которая распалась на два каона и всегда описывается некоторой сферической гармоникой. В частности, если распадающееся состояние обладало положительной четностью, то  $f(q)$  будет четной функцией  $q$ ; если же распадающееся состояние обладало отрицательной четностью, то  $f(q)$  будет нечетной функцией  $q$ . Так как каоны имеют нулевые спины то функция  $f(q)$  четная при четном квантовом числе полного момента количества движения  $J$  состояния начальной частицы и нечетная при нечетном квантовом числе  $J$ :

$$\begin{aligned} \text{четное число } J \text{ и положительная четность} &\Rightarrow f(q) = f(-q), \\ \text{нечетное число } J \text{ и отрицательная четность} &\Rightarrow f(q) = -f(-q). \end{aligned}$$

Состояние (7.32) в конце концов распадается на пионы, которые наблюдаются экспериментально. Представим состояние (7.32) в виде линейной комбинации состояний каонов  $K_1$  и  $K_2$ , которые более удобны при описании последующих процессов распада свободных каонов на пионы, для чего подставим в (7.32) формулы (7.30а) и (7.30б); в результате получим

$$|\psi\rangle = \sum_q \frac{1}{2} f(q) (a_{K_1 q}^\dagger + a_{K_2 q}^\dagger) (a_{K_2, -q}^\dagger - a_{K_1, -q}^\dagger) |0\rangle, \quad (7.33a)$$

$$\begin{aligned} \psi\rangle = \sum_q \frac{1}{2} f(q) \{ & [a_{K_1 q}^\dagger a_{K_2, -q}^\dagger - a_{K_2 q}^\dagger a_{K_1, -q}^\dagger] - \\ & - [a_{K_1 q}^\dagger a_{K_1, -q}^\dagger - a_{K_2 q}^\dagger a_{K_2, -q}^\dagger] \} |0\rangle. \quad (7.33б) \end{aligned}$$

Поскольку  $q$  — индекс суммирования, то мы можем везде в сумме (7.33б) заменить  $q$  на  $-q$ , т. е. написать

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = \sum_q \frac{1}{2} f(-q) \{ & [a_{K_1, -q}^\dagger a_{K_2 q}^\dagger - a_{K_2, -q}^\dagger a_{K_1 q}^\dagger] - \\ & - [a_{K_1, -q}^\dagger a_{K_1 q}^\dagger - a_{K_2, -q}^\dagger a_{K_2 q}^\dagger] \} |0\rangle. \quad (7.33в) \end{aligned}$$

Сравнивая формулы (7.33б) и (7.33в), мы замечаем, что слагаемые, заключенные в первых квадратных скобках, в обеих формулах фактически одинаковы, так как бозонные операторы рождения коммутируют между собой, но эти слагаемые отличаются знаком. Слагаемые, заключенные во вторых квадратных скобках в фор-

мулах (7.33б) и (7.33в), полностью совпадают. Значит, если  $f(q)$  — нечетная функция  $q$ , то слагаемые, заключенные во второй квадратной скобке в формуле (7.33в), при суммировании должны обращаться в нуль; если же  $f(q)$  — четная функция, то должны обращаться в нуль слагаемые, заключенные в первой квадратной скобке. Отсюда следует, что если рассматриваемое состояние  $|\psi\rangle$  начальной элементарной частицы обладает положительной четностью и четным квантовым числом момента количества движения, то для него можно написать

$$|\psi_{\text{четн}}\rangle = - \sum_q \frac{1}{2} f(q) \{a_{K_1 q}^\dagger a_{K_1, -q}^\dagger - a_{K_2 q}^\dagger a_{K_2, -q}^\dagger\} |0\rangle, \quad (7.34a)$$

т. е. это состояние представляет собой линейную комбинацию состояний двух каонов  $K_1$  и двух каонов  $K_2$ . Каон  $K_1$  может распадаться на два пиона, так как время его жизни мало, а каон  $K_2$  не может распадаться на два пиона, так как время его жизни велико и его распады обычно даже и не наблюдаются в пузырьковой камере. Теперь мы легко можем заключить, что формула (7.34a) описывает такое состояние, для которого вероятность одновременного распада обоих рожденных каонов на пионы равна 50%, а вероятность того, что ни один из обоих получившихся каонов не распадается на пионы, также равна 50%. Вероятность того, что один из рожденных каонов распадется на два пиона, а второй будет жить и не распадется, равна нулю.

С другой стороны, если состояние  $|\psi\rangle$  обладает отрицательной четностью и нечетным квантовым числом момента количества движения, то для него можно написать

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{нечетн}}\rangle &= \sum_q \frac{1}{2} f(q) \{a_{K_1 q}^\dagger a_{K_2, -q}^\dagger - a_{K_2 q}^\dagger a_{K_1, -q}^\dagger\} |0\rangle = \\ &= \sum_q f(q) \{a_{K_1 q}^\dagger a_{K_2, -q}^\dagger\} |0\rangle. \end{aligned} \quad (7.34б)$$

Это состояние содержит один каон  $K_1$  и один каон  $K_2$ . Каон  $K_1$  имеет короткое время жизни и обязательно распадается на пару пионов; каон  $K_2$  не распадается на пару пионов. Следовательно, один [именно один из каонов, имеющих в состоянии (7.34б)] распадается на два пиона, а второй продолжает жить.

Итак, мы видим, что, исследуя экспериментально распады на пионы двухкаонного состояния, образовавшегося при распаде состояния  $|\psi\rangle$  начальной элементарной частицы, можно определить, положительна или отрицательна четность промежуточного двухкаонного состояния и соответственно четно или нечетно

квантовое число ее момента количества движения. Если одновременно распадаются оба каона или оба каона одновременно не распадаются, то исследуемое двухкаонное состояние обладает четным квантовым числом момента количества движения и положительной четностью. Если же распадается один из двух каонов на два пиона, а другой продолжает жить, не распадаясь, то исследуемое двухкаонное состояние обладает нечетным квантовым числом момента количества движения и отрицательной четностью. Эти соображения успешно были применены для определения четности и квантового числа момента количества движения  $\phi$ -мезона, а также при исследовании аннигиляции антипротонов с нулевой скоростью.

Обратите внимание, что состояния (7.32) — (7.34) более просто записываются в формализме вторичного квантования, чем в шредингеровском представлении. Действительно, в шредингеровском представлении обе частицы пришлось бы снабжать номерами 1 и 2, так как одному реальному физическому состоянию (7.32) соответствовало бы два шредингеровских «состояния»: одно, в котором частица 1 является каоном  $K^0$ , а частица 2 — каоном  $\bar{K}^0$ , и второе — с противоположной нумерацией частиц. При использовании симметричных по перестановке частиц шредингеровских двухчастичных волновых функций нам пришлось бы учитывать вдвое больше членов, чем в формализме вторичного квантования.

### § 6. Парадокс Эйнштейна — Розена — Подольского на примере двухкаонной системы

Процессы распада двухкаонной системы позволяют проиллюстрировать один из парадоксов квантовой механики, который в свое время сильно беспокоил первых исследователей, занимавшихся квантовой теорией, а именно речь идет о так называемом парадоксе Эйнштейна, Розена и Подольского. Рассмотрим два каона, которые испускаются в положительном и отрицательном направлениях оси  $z$  при распаде покоящейся элементарной частицы, находящейся в состоянии с отрицательной четностью. Если мы будем регистрировать каждый из каонов, наблюдая, скажем, распад его на пионы, то легко установим, что половина летящих в направлении  $+z$  или  $-z$  каонов будет каонами  $K_1$ , а половина — каонами  $K_2$ . Если теперь мы будем детектировать одновременно оба каона, рожденных при распаде одной и той же элементарной частицы, то обнаружим, что один из них обязательно будет каоном  $K_1$ , а другой — каоном  $K_2$ . При распаде элементарной частицы с отрицательной четностью мы никогда не обнаружим одновременно два каона  $K_1$  или два каона  $K_2$ .

С другой стороны, если мы будем регистрировать каждый из каонов, наблюдая поглощение его в слое вещества, то найдем, что половина летящих в направлении  $+z$  или  $-z$  каонов представляет собой каоны  $K^0$ , а половина — каоны  $\bar{K}^0$ . Если мы будем теперь детектировать указанным способом оба каона, *одновременно* образовавшихся при распаде одной и той же частицы, то обнаружим, что один из них обязательно будет каоном  $K^0$ , а другой — каоном  $\bar{K}^0$ . При распаде элементарной частицы с *отрицательной* четностью мы никогда не будем наблюдать одновременно два каона  $K^0$  или два каона  $\bar{K}^0$ .

Поучительно рассмотреть аналогичную ситуацию с одновременным испусканием двух фотонов, находящихся в таком двухфотонном состоянии, в котором они всегда имеют противоположные поляризации независимо от того, каким образом эти поляризации измеряются. Если при этом пучок фотонов, испущенных в любом данном направлении, разделить на компоненты, поляризованные в горизонтальном и вертикальном направлениях, то в результате окажется, что половина фотонов будет в состоянии с поляризацией в горизонтальном направлении и половина — в состоянии с поляризацией в вертикальном направлении. Если затем провести измерение горизонтальной и вертикальной поляризации двух *одновременно* испущенных в противоположных направлениях фотонов, то окажется, что один из фотонов будет поляризован горизонтально, а другой — вертикально, т. е. эти фотоны никогда не будут поляризованы одинаково. Конкретные направления, в которых измеряются поляризации, роли не играют, так как то же самое будет происходить при измерении поляризаций под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ . В этом случае при измерении поляризации фотонов, испущенных в данных направлениях, половина фотонов окажется поляризованной под углом  $+45^\circ$  и половина — под углом  $-45^\circ$ . Если провести измерение поляризации двух *одновременно* испущенных в противоположных направлениях фотонов, то они всегда будут иметь противоположные поляризации, т. е. один фотон будет поляризован под углом  $+45^\circ$ , а второй — под углом  $-45^\circ$ .

Рассмотрим детектор каонов, регистрирующий каоны, испущенные, скажем, в положительном направлении оси  $z$ . Независимо от того, как устроен этот детектор, т. е. регистрируем ли мы в нем распады каонов или наблюдаем сильные взаимодействия каонов, мы все равно обнаружим, что пучок летящих в направлении  $+z$  каонов «неполяризован», т. е. представляет собой равную статистическую смесь двух состояний: либо  $K_1$  и  $K_2$ , либо  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ . Независимо от того, какой базис измеряемых состояний выбран, смесь всегда будет содержать 50% каонов, поляризованных в одном направлении, и 50% каонов, поляризованных в про-

тивоположном направлении. Все точно так же, как для пучка неполяризованного света.

Рассмотрим, однако, «эксперимент на совпадение», позволяющий производить *одновременную* регистрацию распадов каонов, испущенных в положительном и отрицательном направлениях оси  $z$ , т. е. в направлениях  $+z$  и  $-z$  (это достигается использованием той или иной радиотехнической схемы совпадения). В этом эксперименте факт регистрации определенного каона, распространяющегося в направлении  $-z$ , автоматически приводит к разделению пучка каонов, распространяющихся в направлении  $+z$ , на две компоненты  $K_1$  и  $K_2$ . Те каоны, которые регистрируются *одновременно* с регистрацией каонов  $K_1$  в направлении  $-z$ , будут пучком чистых каонов  $K_2$ , и наоборот.

В аналогичной ситуации с фотонами это соответствует тому, что пучок неполяризованных фотонов, распространяющийся в определенном направлении, экспериментально будет разделяться на компоненты, поляризованные в горизонтальном и вертикальном направлениях, только вследствие того, что производится измерение горизонтальной и вертикальной поляризации фотонов другого пучка, распространяющегося в *противоположном* направлении.

До сих пор все было очень разумно даже с классической точки зрения. Действительно, пучок каонов состоит наполовину из каонов  $K_1$ , наполовину из каонов  $K_2$ . Мы можем считать, что каждый каон находится во вполне определенном состоянии: либо в состоянии  $K_1$ , либо в состоянии  $K_2$ . При этом два каона, испускаемых одновременно, всегда находятся в различных состояниях. Поэтому, регистрируя состояние каона, распространяющегося в направлении  $-z$ , мы тем самым просто получаем определенную информацию о его партнере, испущенном одновременно с ним, но в направлении  $+z$ .

Это же можно сказать и в отношении фотонов. Мы можем считать, что все испускаемые фотоны находятся в состояниях с вполне определенной поляризацией (или в горизонтальном, или в вертикальном направлении), причем они испускаются парами с противоположными состояниями поляризации. Отсюда легко понять, что измерение поляризации фотонов одного пучка дает информацию и о поляризации фотонов другого пучка.

Предположим, однако, что вместо регистрации распадов каонов мы будем регистрировать сильные взаимодействия каонов, т. е. определять, каким является каждый из каонов, распространяющихся вдоль направления  $-z$ : каоном  $K^0$  или каоном  $\bar{K}^0$ . Тем самым мы разделим неполяризованный пучок каонов, испускаемых в направлении  $+z$ , на две компоненты: каоны  $K^0$  и каоны  $\bar{K}^0$ .

Те каоны, которые регистрируются по схеме совпадения одновременно с регистрацией каона  $K^0$  в направлении  $-z$ , будут составлять пучок чистых каонов  $\bar{K}^0$ , и наоборот. Для фотонов это соответствует разделению неполяризованного пучка, выходящего в направлении  $+z$ , на компоненты, поляризованные под углами  $+45^\circ$  и  $-45^\circ$ ; такое разделение является следствием измерения поляризации фотонов *другого* пучка, распространяющегося в направлении  $-z$ . И здесь снова результат нашего эксперимента допускает простую классическую интерпретацию. Каждый испускаемый каон находится в определенном состоянии — либо в состоянии  $K^0$ , либо в состоянии  $\bar{K}^0$ , причем каоны, испускаемые одновременно, всегда находятся в противоположных состояниях. Следовательно, любой данный каон, распространяющийся в направлении  $+z$ , всегда находится во вполне определенном состоянии  $K^0$  или  $\bar{K}^0$ , и поэтому измерение, производимое над его партнером, распространяющимся вдоль направления  $-z$ , просто устанавливает, какое же именно это состояние.

Если мы, однако, сопоставим результаты обоих рассмотренных выше экспериментов с каонами, *то не сможем уже более утверждать, что каоны испускаются в некоторых вполне определенных состояниях*. Действительно, каон, испущенный в направлении  $+z$ , должен быть либо каоном  $K_1$ , либо каоном  $K_2$ , но он также может быть либо каоном  $K^0$ , либо каоном  $\bar{K}^0$ . Если мы определяем его состояние на основании эксперимента, в котором исследуется *распад* каона-партнера, испущенного одновременно с ним и летящего в противоположном направлении  $-z$ , то рассматриваемый каон должен быть определенно либо каоном  $K_1$ , либо каоном  $K_2$ , и это сразу устанавливается по полученному нами результату измерения. Если же над каоном, летящим по направлению  $-z$ , мы производим эксперимент, в котором исследуем *взаимодействие* каона с веществом, то каон, распространяющийся вдоль направления  $+z$ , должен быть обязательно или каоном  $K^0$ , или каоном  $\bar{K}^0$ , и это устанавливается по полученному нами результату измерения. Таким образом, даже тогда, когда разлетевшиеся в направлениях  $+z$  и  $-z$  каоны *находятся очень далеко друг от друга* и не взаимодействуют, мы все равно можем повлиять на состояние каона, улетевшего в направлении  $+z$ , *выбрав тот или иной способ детектирования состояния каона, улетевшего в направлении  $-z$* , иначе говоря, выбрав, что детектировать — распады или сильные взаимодействия каонов. В аналогичной ситуации с фотонами мы должны заключить на основании эксперимента по определению поляризации в горизонтальном или вертикальном направлении фотона, испущенного одновременно в направлении  $-z$ , что заданный фотон, распространяющийся в направлении  $+z$ , обладает поляризацией либо в горизонтальном, либо в вертикаль-

ном направлении. Если же над фотоном, испущенным в направлении  $-z$ , мы будем производить эксперимент по измерению поляризации под углами  $\pm 45^\circ$ , то фотон, распространяющийся в направлении  $+z$ , будет обязательно поляризован либо под углом  $+45^\circ$ , либо  $-45^\circ$ .

При рассмотрении состояний одного каона наша аналогия с поляризованным светом очень полезна, потому что любое заданное состояние поляризации фотона тоже можно всегда выразить по-разному в виде различных линейных комбинаций разных базисных состояний поляризации. Измеряя с помощью призмы Николя, ориентированной под углом  $45^\circ$ , поляризацию фотона, о котором нам известно, что он поляризован в горизонтальном направлении, мы заставляем фотон изменить свою поляризацию и стать поляризованным под углом  $+45^\circ$  или  $-45^\circ$ . В точности так же, регистрируя сильные взаимодействия каона, о котором нам известно, что он находится в состоянии  $K_2$ , мы «заставляем» его изменить состояние и перейти в состояние  $K^0$  или  $\bar{K}^0$ . Хотя состояния двухкаонной системы формально аналогичны состояниям отдельных каонов, физически они коренным образом отличаются от них, так как изменение базиса при том или ином измерении приводит к изменению состояний одновременно обоих каонов, находящихся на большом расстоянии друг от друга. Также обстоит дело и с состояниями двухфотонной системы. Измерение поляризации с помощью призмы Николя, ориентированной под углом  $45^\circ$ , приводит не только к тому, что фотон, над которым проводится измерение, переходит в состояние с поляризацией под углом  $+45^\circ$  или  $-45^\circ$ , но одновременно также влияет на другой фотон, находящийся далеко от исследуемого. В точности так же и регистрация взаимодействий одного из двух каонов с веществом не только переводит этот каон в состояние  $K^0$  или  $\bar{K}^0$ , но одновременно *влияет и на другой каон, находящийся далеко от первого*, над которым мы проводим измерение. Таким образом, описание системы в квантовой механике с помощью волновой функции подразумевает наличие когерентных корреляций в системе на макроскопически больших расстояниях. Эти корреляции в квантовой механике действительно существуют и наблюдаются экспериментально.

Данный пример по сравнению с примером, разобранным в конце § 3 настоящей главы, очень хорошо иллюстрирует квантовомеханическую интерференцию, которая здесь еще сильнее отличается от наших интуитивных представлений об интерференции трехмерных волн, приходящих в заданную пространственную точку по различным путям. Однако формально мы здесь просто сталкиваемся еще с одной разновидностью эксперимента «с двумя шеллями». Волновая функция (7.32) содержит слагаемое, соответствующее испусканию каона  $K^0$  в направлении  $+z$  и одновременно испусканию каона  $\bar{K}^0$  в направлении  $-z$ . Она содержит также

слагаемое, соответствующее испусканию каона  $K^0$  в направлении  $-z$  и одновременному испусканию каона  $\bar{K}^0$  в направлении  $+z$ . Если теперь мы проследим за распадами испущенных каонов и найдем, в каком из двух состояний  $K_1$  или  $K_2$  находится каждый каон, то окажется, что каждому из этих новых состояний двухкаонной системы отвечает вклад каждого из упомянутых выше слагаемых в волновую функцию. Вклады от этих обоих слагаемых аналогичны вкладам от двух различных «путей» луча света в эксперименте с двумя щелями. В случае исходного распадающегося на каоны состояния с отрицательной четностью (7.34б) эти вклады интерферируют, усиливая амплитуду состояния  $K_1K_2$  и ослабляя амплитуды состояний  $K_1K_1$  и  $K_2K_2$ . Именно таким образом мы строим амплитуды вероятностей, позволяющие предсказывать результаты тех или иных измерений, проводимых одновременно с двумя частицами, находящимися на макроскопических расстояниях друг от друга, и обнаруживаем, что в эти амплитуды действительно вносят вклады составляющие, распространяющиеся по различным «путям», т. е. по пути  $K^0(z)\bar{K}^0(-z)$  и по пути  $K^0(-z)\bar{K}^0(z)$ .

### § 7. Сдвиг массы каона

Взаимодействие, являющееся причиной распадов каона на пару пионов, ведет также к изменению, или сдвигу, массы каона. Этого следует ожидать, так как добавление возмущения к гамильтониану должно изменять, или сдвигать, собственные значения энергии последнего. Сдвиг энергии распадающегося состояния, вообще говоря, экспериментально ненаблюдаем, так как для его экспериментального обнаружения необходимо измерить как действительно наблюдаемую энергию, так и энергию при *отсутствии* взаимодействия, что невозможно сделать. Однако для нейтральных каонов такие сдвиги масс частиц экспериментально измерить можно, поскольку имеются два состояния каона, т. е. состояния  $K_1$  и  $K_2$ , которые при отсутствии взаимодействия являются вырожденными. В приближении, когда учитывается только распад на два пиона и не учитываются другие моды распада, взаимодействие (7.27а) оказывает влияние лишь на состояние  $K_1$  и никак не влияет на состояние  $K_2$ . Поэтому соответствующее изменение массы каона  $K_1$  проявляется как разность масс каонов  $K_1$  и  $K_2$ .

Попытаемся вычислить этот сдвиг массы с помощью обычной невременной теории возмущений. Невозмущенным состоянием будет состояние одного покоящегося каона; при этом мы должны вычислить изменение энергии этого состояния, учитывая действие возмущения (7.12). Поскольку среднее значение возмущающего оператора (7.12) для состояния, имеющего один каон, равно

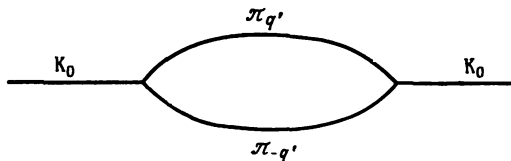


нулю, поправка первого приближения тоже обращается в нуль. Поправка второго порядка вычисляется по обычной формуле теории возмущений второго порядка. Для нее мы получаем

$$\Delta E = \sum_{q'} \frac{\langle K_0 | V | \pi_{q'} \pi_{-q'} \rangle \langle \pi_{q'} \pi_{-q'} | V | K_0 \rangle}{M_K c^2 - 2E_{\pi q'}}, \quad (7.35a)$$

$$\Delta E = \sum_{q'} \frac{|g(0, q')|^2}{M_K c^2 - 2E_{\pi q'}}. \quad (7.35b)$$

Эту поправку второго порядка можно физически понять, как происходящую от виртуального распада каона на два пиона



Фиг. 7.1.

и обратного виртуального образования из этих пионов каона, как это изображено на фиг. 7.1.

Диаграммы такого рода, впервые введенные в квантовую теорию Фейнманом, исключительно удобны для обозначения различных вкладов, имеющих в теории возмущений, и для оперирования с ними.

Формулы (7.35a) и (7.35b), к сожалению, для нас не очень полезны, так как в них суммы по  $q'$  очевидным образом расходятся. Имеются два источника расходимостей сумм: 1) знаменатель обращается в нуль для значения импульса  $q'$ , для которого энергия в промежуточном состоянии точно сохраняется; 2) вклады от слагаемых с большими значениями  $q'$  неограниченно возрастают, если только, конечно, функция  $g(0, q')$  не обрывается по каким-то причинам при больших значениях  $q'$ . Для локального взаимодействия  $g$  не зависит от  $q'$ , и суммы в (7.35a) или в (7.35b) действительно расходятся при больших значениях  $q'$ , так как энергетическая плотность состояний возрастает пропорционально  $q'^2$ , а энергетический знаменатель возрастает только, как  $q'$ . Указанные «инфракрасные» расходимости при малых  $q$  и «ультрафиолетовые» при больших  $q$  иллюстрируют общие особенности таких расходимостей, возникающих в квантовой теории поля. Инфракрасные расходимости несерьезны, их можно всегда устранить в том же самом проводимом вычислении, используя более точное приближение. Ультрафиолетовые расходимости, напротив, очень

серьезны; они являются отражением принципиальных трудностей теории.

Наши инфракрасные расходимости, связанные с обращением в нуль знаменателей в суммах в (7.35а) и (7.35б), действительно не доставляют серьезных неприятностей. Они возникли просто из-за использования формул невременной теории возмущений для невырожденных состояний, хотя в системе имеется вырождение рассматриваемого уровня невозмущенного гамильтониана. Обращение в нуль знаменателей означает, что у нас существует состояние, вырожденное по (невозмущенной) энергии с исходным, и в это состояние наш каон может перейти, сохраняя свою энергию. При правильном применении формул невременной теории возмущений (а этим мы займемся ниже) вид окончательных формул будет немного другим: мы должны будем брать главное значение расходящихся интегралов (7.35а) и (7.35б), которые непосредственно получаются из сумм по переменной  $q'$ .

Вторая расходимость сумм или интегралов в (7.35а) и (7.35б) значительно более серьезная, и она не нашла себе еще объяснения. Подобные ультрафиолетовые расходимости появляются во многих задачах квантовой теории поля как результат учета вкладов от промежуточных состояний с очень большими значениями импульсов. Пока не найдено удовлетворительных методов, позволяющих сделать такие интегралы сходящимися, хотя метод, известный как «метод перенормировок», и приводит к вполне осмысленным конечным значениям для экспериментально измеряемых величин (несмотря на то, что в теории имеются расходящиеся интегралы). При конкретных вычислениях для получения конечных осмысленных результатов иногда произвольным способом обрезают взаимодействие при больших значениях импульсов, хотя никакого удовлетворительного метода для определения точного граничного значения импульса пока не найдено.

### **§ 8. Разность масс нейтральных каонов во временной теории возмущений**

Сдвиг массы каона лучше рассчитывать на основе временной теории возмущений. Из формулы (7.35) непосредственно следует, что сдвиг массы имеет второй порядок малости по взаимодействию  $V$ , и поэтому для его вычисления необходимо пользоваться теорией возмущений во втором порядке. Конечно, мы могли бы здесь применить метод временной теории возмущений в том виде, в котором он был развит в § 2 настоящей главы для получения формул первого приближения, т. е. просто распространить приведенные там рассуждения на второй порядок. Мы, однако, воспользуемся ниже другим способом, более удобным для вычисления поправок высоких порядков. Отыскивать приближенное решение системы

линейных дифференциальных уравнений, что мы сделали в § 2 настоящей главы, было очень полезно из педагогических соображений. Действительно, каждый из коэффициентов  $\alpha$  и  $\beta_a$ , рассмотренных там, имеет очень простой физический смысл. Исследование временной зависимости этих коэффициентов позволяет получить наглядную физическую картину явления. Однако проведение таких расчетов для нахождения решения системы дифференциальных уравнений во все более высоких приближениях быстро становится непрактичным, так как число уравнений и число неизвестных оказываются настолько большими, что исследовать их уже невозможно.

Более удобный способ рассуждений начинается с преобразования дифференциального уравнения Шредингера к интегральному уравнению. Ниже мы воспользуемся этим способом получения формул теории возмущений для вычисления разности масс каонов.

Начнем с формального преобразования временного уравнения Шредингера

$$(H_0 + V) \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (7.36a)$$

Умножая его на  $e^{iH_0 t/\hbar}$ , получаем

$$e^{iH_0 t/\hbar} [H_0 + V] \psi = i\hbar e^{iH_0 t/\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{iH_0 t/\hbar} \psi] + H_0 e^{iH_0 t/\hbar} \psi. \quad (7.36b)$$

Это уравнение можно упростить, приведя его к виду

$$e^{iH_0 t/\hbar} V \psi = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t/\hbar} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{iH_0 t/\hbar} \psi]. \quad (7.36b')$$

Уравнение (7.36b') можно переписать и в такой форме:

$$V(t) \psi_I = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_I, \quad (7.37a)$$

где

$$\psi_I = e^{iH_0 t/\hbar} \psi, \quad (7.37b)$$

$$V(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (7.37c)$$

Функция  $\psi_I$  называется волновой функцией в «представлении взаимодействия». Уравнение (7.37a) — уравнение Шредингера в этом представлении.

Если рассмотреть приближенное решение первого порядка для системы уравнений из § 2 настоящей главы в представлении взаимодействия, то, как можно убедиться, все выражения упрощаются. Вводя дополнительный экспоненциальный множитель в уравнение (7.37b), мы упрощаем вид волновой функции, так как этот множитель ведет к уничтожению зависящих от времени экспоненциальных фазовых множителей, появляющихся в формулах (7.16a) и (7.16b).

Формальное интегрирование уравнения (7.37а) приводит к интегральному уравнению для  $\psi_I$ , которое имеет вид

$$\psi_I(t) = \psi_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V(t_1) \psi_I(t_1) dt_1. \quad (7.38a)$$

Если взаимодействие  $V$  мало, то уравнение (7.38а) можно решить методом последовательных приближений и получить его решение в виде следующего ряда по степеням взаимодействия:

$$\begin{aligned} \psi_I(t) = & \psi_I(t_0) + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t V(t_1) \psi_I(t_0) dt_1 + \\ & + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t V(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} V(t_2) \psi_I(t_0) dt_2 + \dots \end{aligned} \quad (7.38б)$$

Используем теперь уравнение (7.38б) для исследования процесса распада покоящегося каона. Для удобства положим  $t_0 = 0$ . Тогда мы получим

$$\psi_I(t_0) \equiv \psi_I(0) = |K_{r0}\rangle = a_{K_{r0}}^\dagger |0\rangle; \quad (7.39)$$

здесь мы ввели дополнительный индекс  $r$  для нумерации состояния каона в двумерном подпространстве, являющемся пространством линейных комбинаций состояний  $K_1$  и  $K_2$ . В последующие моменты времени  $t > t_0$  волновая функция будет содержать не только каонную компоненту, но также и двухпионную компоненту, как в (7.8а). Если бы мы взяли оператор взаимодействия  $V$  более общего вида, включающий другие моды распада, то в волновую функцию вошли бы также и другие компоненты.

Сдвиг массы каона определяется по виду зависимости каонной компоненты волновой функции от времени. Чтобы найти его, вычислим скалярное произведение полной волновой функции (7.38б) и волновой функции каонного состояния с нулевым импульсом  $|K_{s0}\rangle$ ; это даст

$$\begin{aligned} \langle K_{s0} | \psi_I(t) \rangle = & \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle + \\ & + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{r0} \rangle dt_2 + \dots \end{aligned} \quad (7.40a)$$

Линейный по  $V$  член в (7.38б) не вносит вклада в скалярное произведение (7.40а), поскольку оператор  $V$  не имеет ненулевых матричных элементов между состояниями, содержащими по одному каону. Матричный элемент, входящий во второе слагаемое в пра-

вой части формулы (7.40а), можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{r0} \rangle &= \\ &= \sum_i \langle K_{s0} | V | i \rangle \langle i | V | K_{r0} \rangle e^{-i(E_i - E_{K0})(t_1 - t_2)/\hbar}, \quad (7.40б) \end{aligned}$$

где суммирование ведется по всем промежуточным состояниям  $|i\rangle$ , являющимся собственными состояниями гамильтониана  $H_0$ , соответствующими собственным значениям  $E_i$ . Временную зависимость матричных элементов мы раскрыли с помощью формулы (7.37в).

Проинтегрируем теперь соотношение (7.40б) по  $t_2$ ; в результате получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t_1} \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{r0} \rangle dt_2 &= \\ &= \sum_i \langle K_{s0} | V | i \rangle \langle i | V | K_{r0} \rangle \left\{ \frac{1 - e^{-i(E_i - E_{K0})t_1/\hbar}}{E_i - E_{K0}} \right\}. \quad (7.41а) \end{aligned}$$

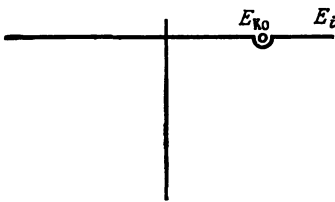
Сумму по промежуточным состояниям можно упростить, преобразовав ее в интеграл по энергии  $E_i$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t_1} \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{r0} \rangle dt_2 &= \\ &= \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \langle K_{s0} | V | i \rangle \langle i | V | K_{r0} \rangle \left\{ \frac{1 - e^{-i(E_i - E_{K0})t_1/\hbar}}{E_i - E_{K0}} \right\} \times \\ &\quad \times \rho(E_i) dE_i, \quad (7.41б) \end{aligned}$$

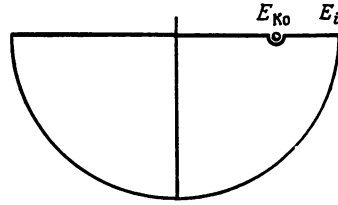
где  $\rho(E_i)$  — плотность промежуточных состояний, приходящихся на интервал энергий  $dE_i$  для какой-то одной заданной моды распада, а сумма ведется по всем тем модам распада, которые действительно имеют промежуточные состояния с энергией  $E_i$ . Интеграл в (7.41б) мы взяли в пределах  $\pm\infty$ , хотя те состояния, энергия которых меньше энергии покоя двух пионов, и не вносят никакого вклада в интеграл. Формула (7.41б), однако, все равно остается справедливой, так как плотность состояний  $\rho(E_i)$  для этих энергий просто равна нулю.

Интеграл (7.41б) можно еще больше упростить, рассматривая его как контурный интеграл по действительной прямой на комплексной плоскости. Мы можем так деформировать этот контур, чтобы он обходил точку  $E_i = E_{K0}$  по малой полуокружности, расположенной в нижней полуплоскости, как показано на фиг. 7.2, так как подынтегральное выражение нашего интеграла в окрест-

ности точки  $E_i = E_{K_0}$  аналитично. Действительно, хотя каждое из двух слагаемых, стоящих в фигурных скобках в (7.41б), имеет полюс в точке  $E_i = E_{K_0}$ , все суммарное подынтегральное выражение в целом не имеет никакого полюса в этой точке. Теперь, после того как мы деформировали контур, чтобы он обходил полюс (фиг. 7.2), мы можем рассматривать каждое из двух указанных слагаемых, стоящих в фигурных скобках, самостоятельно. Вычисление интеграла от второго слагаемого по рассматриваемому контуру существенно упрощается, если замкнуть контур большой полуокружностью радиусом  $\Delta E$ , лежащей в нижней полуплоскости, как показано на фиг. 7.3. Это можно сделать,



Фиг. 7.2.



Фиг. 7.3.

потому что у нас  $t$  больше нуля, показатель экспоненты в (7.41б) отрицателен для комплексных значений  $E_i$  с отрицательными мнимыми частями и, следовательно, интеграл по дуге большой полуокружности при  $t_1 \gg \hbar/\Delta E$  пренебрежимо мал. Таким образом, мы получаем, что интеграл (7.41б), берущийся по контуру, показанному на фиг. 7.2, в точности равен интегралу по замкнутому контуру, изображенному на фиг. 7.3. Последний интеграл, согласно теореме Коши, обращается в нуль, если только подынтегральная функция аналитична внутри данной полуокружности. Выбрав теперь радиус  $\Delta E$  большой полуокружности так, чтобы все особые точки подынтегрального выражения оказались лежащими вне контура интегрирования, мы тем самым зафиксируем минимальное значение  $t_1$ , для которого будет еще справедливо наше рассмотрение. Если  $\hat{V}$  — регулярный оператор, то учет единственной сингулярности  $\rho(E_i)$  при  $E_i = 0$  приводит к условию  $t_1 \gg \hbar/E_{K_0}$ , которое не является серьезным ограничением. Сингулярности  $\hat{V}$  нужно интерпретировать с учетом обсуждения, приведенного после (7.22). Таким образом, мы получаем

$$\int_C \langle K_{s_0} | V | i \rangle \langle i | V | K_{r_0} \rangle \left\{ \frac{e^{-i(E_i - E_{K_0})t_1/\hbar}}{E_i - E_{K_0}} \right\} \times \\ \times \rho(E_i) dE_i \approx 0, \quad \text{если } t_1 \gg \Delta E/\hbar. \quad (7.42)$$

Интеграл (7.42) — единственный вклад в интеграл (7.41б), который явно зависит от временной переменной  $t_1$ . Поскольку он обращается в нуль, то интеграл (7.41б) не зависит от времени и равен интегралу от первого слагаемого в подынтегральном выражении в (7.41б), взятому по контуру  $C$ , изображенному на фиг. 7.2. Контурный интеграл по малой полуокружности, расположенной в нижней полуплоскости, вычисляется легко. Контурный интеграл по оставшейся части контура, т. е. по всей действительной оси, за исключением малой окрестности полюса  $E_i = E_{K_0}$ , равен главному значению интеграла, берущегося по действительной оси. Таким образом, имеем

$$\sum_i \int_C \frac{\langle K_{s_0} | V | i \rangle \langle i | V | K_{r_0} \rangle}{E_{K_0} - E_i} \rho(E_i) dE_i = \\ = \langle K_{s_0} | M | K_{r_0} \rangle - \frac{1}{2} i \langle K_{s_0} | \Gamma | K_{r_0} \rangle, \quad (7.43a)$$

где

$$\langle K_{s_0} | M | K_{r_0} \rangle = \mathcal{P} \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle K_{s_0} | V | i \rangle \langle i | V | K_{r_0} \rangle}{E_{K_0} - E_i} \rho(E_i) dE_i \quad (7.43б)$$

и

$$\langle K_{s_0} | \Gamma | K_{r_0} \rangle = 2\pi \sum_f \langle K_{s_0} | V | f \rangle \langle f | V | K_{r_0} \rangle \rho(E_f), \quad (7.43в)$$

причем здесь  $|f\rangle$  означает конечное наблюдаемое состояние, которое получается в результате распада каона; при этом энергия строго сохраняется.

Мы проводим суммирование по состояниям  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$  в (7.43), что позволяет нам учесть больше одной возможной моды распада каонов. Формулы (7.43а) — (7.43в) удобно записать через матрицу рассеяния

$$\langle K_{s_0} | T | K_{r_0} \rangle = \langle K_{s_0} | M | K_{r_0} \rangle - \frac{1}{2} i \langle K_{s_0} | \Gamma | K_{r_0} \rangle. \quad (7.44a)$$

Матрица  $T$  — неэрмитова, матрицы  $M$  и  $-\frac{1}{2} i\Gamma$  соответственно составляют ее эрмитову и антиэрмитову части. Из формул (7.41) — (7.43) следует формула

$$\langle K_{s_0} | T | K_{r_0} \rangle = \\ = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t_1} \langle K_{s_0} | V(t_1) V(t_2) | K_{r_0} \rangle dt_2, \quad \text{если } t_1 \gg \hbar/\Delta E. \quad (7.44б)$$

Формулу (7.44б) можно теперь подставить в формулу (7.40а), и так как (7.44б) не зависит от времени, то можно совершенно

элементарно провести интегрирование по времени. Таким образом, мы получим окончательную формулу

$$\langle K_{s0} | \psi_I(t) \rangle = \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle - \frac{it}{\hbar} \langle K_{s0} | T | K_{r0} \rangle. \quad (7.45)$$

Из формулы (7.45) видно, что для определенного начального состояния  $|K_{r0}\rangle$ , распадающегося по стандартному экспоненциальному закону, выражение (7.40а) должно иметь следующий вид:

$$\langle K_{r0} | \psi_I(t) \rangle = e^{-\gamma t/2\hbar} e^{-i\delta m c^2 t/\hbar}, \quad (7.46a)$$

где  $\gamma/\hbar$  — «постоянная распада», т. е. вероятность перехода в единицу времени, а  $\delta m$  — искомый сдвиг массы каона. Если мы разложим экспоненты в (7.46а) в ряд по  $t$ , то с точностью до членов первого порядка по  $t$  получим формулу такого же вида, как (7.45):

$$\langle K_{r0} | \psi_I(t) \rangle \approx 1 - \frac{it}{\hbar} \left[ \delta m c^2 - \frac{1}{2} i\gamma \right]. \quad (7.46b)$$

Если состояние  $|K_{r0}\rangle$  одновременно является собственным состоянием матриц  $M$  и  $\Gamma$ , то формула (7.45) в точности совпадает с формулой (7.46б), в которой  $\delta m c^2$  равно собственному значению матрицы  $M$ , а  $\gamma$  — собственному значению матрицы  $\Gamma$  для данного состояния  $|K_{r0}\rangle$ . Значение  $\gamma$ , найденное из формулы (7.43в), полностью согласуется со значением для вероятности перехода в единицу времени, даваемым формулой (7.20), полученной в теории возмущений первого порядка. Далее, из формулы (7.43б) видно, что выражение для изменения массы в точности совпадает с ранее приведенным выражением (7.35), полученным во втором порядке невременной теории возмущений, в которой не учтено вырождение начального невозмущенного состояния [при этом в выражении (7.35) устранена инфракрасная расходимость, т. е. интеграл в нем взят в смысле главного значения].

Так как  $M$  и  $\Gamma$  — матрицы размерности  $2 \times 2$ , они имеют по два собственных вектора и по два собственных значения. В случае когда гамильтониан взаимодействия  $V$  имеет простой вид (7.24), т. е. описывает только одну-единственную моду распада, состояние  $K_2$  [см. (7.25б)] полностью отделяется от этой моды, и матрица  $\tilde{T}$  становится тривиальной, т. е. имеет диагональный вид. Для гамильтониана взаимодействия общего вида СР-четность сохраняется и состояния  $K_1$  и  $K_2$ , определенные формулами (7.30), должны быть одновременно собственными векторами матриц  $M$  и  $\Gamma$ , так как из формул (7.31) вытекает, что они являются собственными векторами оператора СР-четности, соответствующими собственным значениям с противоположными знаками. Следовательно, эти два состояния не могут быть связаны матричным элементом оператора, сохраняющего СР-четность.



Два состояния  $K_1$  и  $K_2$  соответствуют разным собственным значениям матриц  $M$  и  $\Gamma$  и, следовательно, имеют различные сдвиги масс и времена жизни. Если начальное состояние  $|K_{r0}\rangle$  представляет собой линейную комбинацию состояний  $K_1$  и  $K_2$ , то его распад не будет происходить по простому экспоненциальному закону; распады его  $K_1$ - и  $K_2$ -компонент будут характеризоваться различными временами жизни. Далее, если  $K_{s0}$  — состояние, ортогональное рассматриваемому состоянию  $K_{r0}$ , то для него скалярное произведение  $\langle K_{s0} | \psi_I(t) \rangle$  будет равно нулю в начальный момент времени  $t = 0$ , но будет отличным от нуля в последующие моменты времени. Только чистые состояния  $K_1$  и  $K_2$ , являющиеся собственными векторами матрицы  $T$ , распадаются по простому экспоненциальному закону и не могут с течением времени переходить друг в друга.

Если матрицы  $M$  и  $\Gamma$ , определенные формулами (7.43б) — (7.43в), не коммутируют друг с другом, то их нельзя одновременно привести к диагональному виду. Эти матрицы действительно могут не коммутировать, так как закон сохранения СР-четности, как теперь известно, нарушается. В таком случае двумя состояниями, не переходящими друг в друга, будут состояния, которые даются собственными векторами неэрмитовой матрицы  $T$  [см. (7.44)]. Эти состояния могут быть неортогональными.

### § 9. Экспоненциальный распад и энергетическая ширина каона

Формула (7.45) справедлива с точностью только до членов первого порядка малости по  $t$ . Чтобы действительно убедиться в экспоненциальном характере закона распада, рассмотрим точное интегральное уравнение (7.38а) и попытаемся найти его решение в виде

$$\psi_I(t) = \sum_s \alpha_s(t) |K_{s0}\rangle + \sum_i \beta_i(t) |i\rangle, \quad (7.47а)$$

где коэффициенты  $\alpha_s(t)$  и  $\beta_i(t)$  удовлетворяют начальным условиям

$$\begin{aligned} \alpha_s(0) &= \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle, \\ \beta_i(0) &= 0, \end{aligned} \quad (7.47б)$$

а через  $|K_{r0}\rangle$  обозначено начальное состояние каона. Коэффициенты  $\alpha_s(t)$  и  $\beta_i(t)$  легко найти, если подставить (7.47а) в ин-

тегральное уравнение (7.38a). Тогда получим

$$\alpha_s(t) = \langle K_{s0} | \Psi_I(t) \rangle = \\ = \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \sum_i \langle K_{s0} | V(t_1) | i \rangle \beta_i(t_1) dt_1, \quad (7.48a)$$

$$\beta_i(t_1) = \langle i | \Psi_I(t_1) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_{s'} \int_0^{t_1} \langle i | V(t_2) | K_{s'0} \rangle \alpha_{s'}(t_2) dt_2. \quad (7.48b)$$

Подставляя (7.48b) в (7.48a), проводя суммирование по состояниям  $|i\rangle$  и используя условие полноты, получаем соотношение

$$\alpha_s(t) = \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{s'} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{s'0} \rangle \alpha_{s'}(t_2) dt_2, \quad (7.49a)$$

которое можно упростить, если изменить порядок интегрирований по  $t_1$  и  $t_2$ ; в результате будем иметь

$$\alpha_s(t) = \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle - \\ - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{s'} \int_0^t dt_2 \alpha_{s'}(t_2) \int_{t_2}^t \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{s'0} \rangle dt_1. \quad (7.49b)$$

Интеграл по  $t_1$  в соотношении (7.49b) в точности равен матричному элементу матрицы рассеяния, определенному в (7.44б). В этом легко можно убедиться, изменив обозначение переменной интегрирования в (7.49b) и заметив, что подынтегральное выражение в (7.49b) зависит только от разности  $t_1 - t_2$ . Такая зависимость непосредственно видна из формулы (7.40б), в которой этот матричный элемент выписан в явном виде, т. е.

$$\int_{t_2}^t dt_1 \langle K_{s0} | V(t_1) V(t_2) | K_{s'0} \rangle = \int_{t_2}^t dt_1 \langle K_{s0} | V(t - t_2) V(t - t_1) | K_{s'0} \rangle = \\ = \int_0^{t_a} dt_b \langle K_{s0} | V(t_a) V(t_b) | K_{s'0} \rangle; \quad (7.50)$$

здесь мы положили  $t_1 = t - t_b$  и  $t_2 = t - t_a$ . Используя (7.50), получаем

$$\alpha_s(t) = \langle K_{s0} | K_{r0} \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_2 \sum_{s'} \alpha_{s'}(t_2) \langle K_{s0} | T | K_{s'0} \rangle. \quad (7.51a)$$

Формула (7.51a) представляет собой естественное обобщение формулы (7.45) и сводится к ней, если для  $\alpha_s(t_2)$  взять невозмущенное значение.

Пусть наше начальное состояние  $|K_{r0}\rangle$  будет собственным вектором матрицы  $T$ , соответствующим собственному значению  $\varepsilon - \frac{1}{2}i\gamma$ . Тогда легко убедиться, что решением уравнения (7.51a) будет экспоненциальная функция

$$\alpha_s(t) = \delta_{sr} e^{-\left(\frac{1}{2}\gamma + i\varepsilon\right)t/\hbar}; \quad (7.516)$$

это в точности та функция, которую мы получили бы, если бы использовали нестрогое рассуждение, основанное на формуле первого порядка теории возмущений [см. (7.46)].

Существуют два решения, имеющие строго экспоненциальный вид (7.516) и отвечающие двум собственным векторам матрицы  $T$ . Для каждого из решений величины  $\varepsilon$  и  $\gamma$  суть реальная и мнимая части соответствующего собственного значения матрицы  $T$ . Когда матрицы  $M$  и  $\Gamma$  коммутируют,  $\varepsilon$  и  $\gamma$  как раз совпадают с собственными значениями этих матриц.

Таким образом, мы нашли решения уравнения Шредингера, имеющие экспоненциальный вид (7.516) для начальных состояний  $|K_{s0}\rangle$ , которые являются собственными векторами матрицы  $T$ . При малых  $t$  они совпадают с приближенными решениями (7.45). Собственные векторы матрицы  $T$  для «короткоживущего» и «долгоживущего» состояний мы обозначим через  $|K_S\rangle$  и  $|K_L\rangle$ . Эти состояния будут немного отличаться от собственных состояний оператора  $CP$ -четности, определяемых формулами (7.30), когда учитывается нарушение  $CP$ -четности.

Найдем теперь форму спектра энергий пионов, испущенных при распаде. Мы можем подставить (7.516) в (7.486) и провести интегрирование по времени:

$$\beta_i(t) = \frac{\langle i | V | K_{r0} \rangle \left[ e^{-i(E_{K0} - E_i + \varepsilon - \frac{1}{2}i\gamma)t/\hbar} - 1 \right]}{E_{K0} - E_i + \varepsilon - \frac{1}{2}i\gamma}. \quad (7.52a)$$

Результат (7.52a) отличается от найденного ранее результата (7.166) только дополнительным слагаемым  $\varepsilon - \frac{1}{2}i\gamma$ , появившимся в показателе экспоненты и в знаменателе. Следует учесть, что экспоненциальный множитель, имеющийся в формуле (7.166), при переходе к представлению взаимодействия исчезает.

Вероятность распада с энергией, равной  $E_i$ , дается квадратом модуля выражения (7.52a). Пренебрегая первым слагаемым в квадратных скобках, которое убывает как  $\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma t\right)$  и по

прошествии большого времени становится пренебрежимо малым, получаем

$$|\beta_i(t)|^2 = \frac{|(i|V|K_{r0})|^2}{(E_{K0} - E_i + \epsilon)^2 + \frac{1}{4}\gamma^2}. \quad (7.52b)$$

Таким образом, энергетический спектр продуктов распада дается резонансной кривой, которая имеет максимум при значении энергии  $E_{K0} + \epsilon$  и полуширину, равную  $\gamma$ , т. е. равную полной вероятности перехода в единицу времени, умноженной на  $\hbar$ . Величина  $\gamma$ , следовательно, характеризует не только скорости распада каона, но также и ширину энергетического спектра пионов, полученных при распаде. То, что скорость распада связана с шириной спектра, вытекает из соотношения неопределенности для энергии и времени

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar. \quad (7.53)$$

Действительно, поскольку каон существует только в течение времени порядка  $1/\gamma$ , энергия распадающейся системы определяется с точностью до  $\hbar\gamma$ , т. е. уровень энергии каона имеет ширину порядка  $\hbar\gamma$ .

Эффект разности масс  $K_1 - K_2$  можно обнаружить экспериментально, изучая эволюцию пучка каонов с течением времени. Предположим, что в начальный момент времени  $t = 0$  в какой-то реакции элементарных частиц родился каон  $K^0$ . Тогда состояние этой системы в начальный момент времени  $t = 0$  будет

$$|\psi_I(0)\rangle = |K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |K_1\rangle + |K_2\rangle \}. \quad (7.54)$$

Посмотрим теперь, как изменится это состояние с течением времени. Для простоты возьмем только моду распада на два пиона  $2\pi$ . В этом случае компонента  $K_2$  совсем не распадается; экспоненциально распадается только компонента  $K_1$  с постоянной распада  $\gamma$ . Скалярное произведение состояния  $\psi(t)$  с произвольным каонным состоянием  $|K_s\rangle$  при этом дается соотношением

$$\begin{aligned} \langle K_s | \psi_I(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-\frac{1}{2}\gamma t} e^{-i\delta m t/\hbar} \langle K_s | K_1 \rangle + \langle K_s | K_2 \rangle \right\} = \\ &= \left\{ \frac{1}{2} \left( 1 + e^{-\frac{1}{2}\gamma t} e^{-i\delta m t/\hbar} \right) \langle K_s | K^0 \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left( 1 - e^{-\frac{1}{2}\gamma t} e^{-i\delta m t/\hbar} \right) \langle K_s | \bar{K}^0 \rangle \right\}. \quad (7.55) \end{aligned}$$

В результате учета эффекта разности масс в соотношении (7.55) появился дополнительный фазовый множитель, характеризующий

различие вкладов компонент  $K_1$  и  $K_2$  и периодически изменяющийся со временем. Таким образом, относительное присутствие состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  в нашем пучке каонов в момент времени  $t$ , с одной стороны, будет определяться величиной этой разности масс. С другой стороны, относительное присутствие состояний  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  в пучке каонов можно измерить экспериментально, пропуская пучок каонов через любое вещество, которое поглощает его  $\bar{K}^0$ -компоненту значительно сильнее, чем  $K^0$ -компоненту.

### § 10. Четность, зарядовое сопряжение и операция обращения времени

В изложенной выше теории распада каонов мы учли ограничения, налагаемые на гамильтониан взаимодействия, описывающий распад каонов, законами сохранения импульса и момента количества движения и требованиями лоренцевой инвариантности. Теперь мы покажем, к чему приведет учет требований инвариантности относительно операций пространственной инверсии, зарядового сопряжения и обращения времени. Так как гамильтониан взаимодействия выражен через операторы рождения пионов и каонов в различных состояниях, то мы посмотрим, как эти операторы ведут себя при действии преобразований  $P$  и  $T$ .

Для шредингеровской волновой функции одной частицы оператор *пространственной инверсии*  $P$  определяется соотношением

$$P\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z); \quad (7.56a)$$

откуда немедленно следует условие

$$P^2 = 1. \quad (7.56b)$$

В теории, в которой используется формализм вторичного квантования, нужно знать, как действует оператор  $P$  на волновую функцию, получаемую в результате действия произведения нескольких операторов рождения и уничтожения на вакуумное состояние. Имеем

$$P ABCD |0\rangle = (PAP) (PBP) (PCP) (PDP) P |0\rangle, \quad (7.57a)$$

где  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  — операторы рождения и уничтожения. Поскольку вакуумное состояние инвариантно относительно пространственной инверсии, то можно написать

$$P |0\rangle = |0\rangle, \quad (7.57b)$$

и мы получаем

$$P ABCD |0\rangle = (PAP) (PBP) (PCP) (PDP) |0\rangle. \quad (7.57b)$$

Из (7.56а) и (7.56б) непосредственно следует, что оператор  $P$  эрмитов и унитарен. Таким образом, преобразование операторов

$$A \rightarrow PAP \quad (7.58)$$

будет унитарным преобразованием, показывающим, как изменяется любой оператор  $A$  при пространственной инверсии. Из формулы (7.57в) видно, что действие оператора  $P$  на волновую функцию, записанную во вторично квантованном виде, сводится к тому, что каждый из операторов рождения в этой функции преобразуется согласно (7.58).

Если оператор  $A$  является оператором рождения частицы в определенном собственном состоянии оператора импульса с определенным значением импульса, то преобразованный оператор будет тоже оператором рождения частицы в собственном состоянии оператора импульса с тем же по величине, но противоположным по знаку импульсом. В шредингеровском формализме это можно записать следующим образом:

$$Pe^{iq \cdot x} = e^{-iq \cdot x}; \quad (7.59а)$$

в формализме вторичного квантования имеем

$$Pa_q^\dagger P = P_{\text{вн}} a_{-q}^\dagger, \quad (7.59б)$$

где  $P_{\text{вн}}$  — фазовый множитель, который еще предстоит определить. В шредингеровском формализме [см. (7.59а)] число частиц является интегралом движения, и поэтому подобный фазовый множитель не возникает. В процессах, в которых отдельные частицы рождаются и уничтожаются и в которых четность сохраняется, каждой частице можно приписать определенную «внутреннюю» четность, помимо «пространственной» четности, которая в соответствии с формулой (7.56а) определяется моментом количества движения частицы. Эта внутренняя четность

$$P_{\text{вн}} = \pm 1 \quad (7.60)$$

как раз и появляется в виде фазового множителя в формуле преобразования оператора рождения частицы в формализме вторичного квантования.

Поскольку внутренняя четность для пиона и для каона отрицательна, то для них имеем

$$Pa_{Kq}^\dagger P = -a_{K,-q}^\dagger, \quad (7.61а)$$

$$Pa_{\pi q}^\dagger P = -a_{\pi,-q}^\dagger. \quad (7.61б)$$

Мы можем существенно упростить рассмотрение операции пространственной инверсии, воспользовавшись инвариантностью системы относительно поворотов в пространстве и заметив, что

вектор импульса меняет свое направление на обратное при повороте на угол  $180^\circ$  вокруг любой перпендикулярной к нему оси.

Обозначив через  $R$  оператор поворота на  $180^\circ$  вокруг произвольной оси, перпендикулярной импульсу  $q$ , получим

$$Ra_{Kq}^\dagger R = a_{K,-q}^\dagger, \quad (7.62a)$$

$$Ra_{\pi q}^\dagger R = a_{\pi,-q}^\dagger, \quad (7.62b)$$

откуда следует

$$PRa_{Kq}^\dagger RP = -a_{K,q}^\dagger, \quad (7.63a)$$

$$PRa_{\pi q}^\dagger RP = -a_{\pi,q}^\dagger. \quad (7.63b)$$

Оператор  $PR$  осуществляет поворот на  $180^\circ$  и затем пространственную инверсию. Поскольку оператор инверсии и оператор поворота коммутируют, т. е.

$$PR = RP, \quad (7.64)$$

то оператор  $PR$  просто осуществляет отражение в плоскости, перпендикулярной оси поворота  $R$ . Любое взаимодействие, инвариантное относительно поворотов в пространстве (т. е. сохраняющее момент количества движения), будет инвариантно относительно преобразования  $PR$ , если оно инвариантно относительно пространственной инверсии. Поэтому для проверки инвариантности относительно пространственной инверсии мы можем проводить рассуждения с оператором  $PR$  вместо того, чтобы проводить их с оператором  $P$ . Преимущество использования оператора  $PR$  состоит в том, что он не изменяет импульсов, перпендикулярных оси пространственного поворота, описываемого оператором  $R$ . При распаде покоящегося каона на два или три пиона все импульсы возникающих частиц лежат в одной плоскости. Поэтому в качестве оператора  $R$  всегда можно взять оператор поворота на  $180^\circ$  относительно оси, направленной перпендикулярно этой плоскости. Тогда оператор  $PR$  будет оставлять без изменения импульсы всех рассматриваемых частиц.

Оператор зарядового сопряжения определяется как оператор преобразования частицы в античастицу без изменения квантовых чисел всех остальных степеней свободы частицы. Каон  $\bar{K}^0$  — античастица по отношению к каону  $K^0$ . Пион  $\pi^+$  — античастица по отношению к пиону  $\pi^-$ , а пион  $\pi^0$  — античастица для самого себя. Таким образом, получаем

$$Ca_{K^0}^\dagger C = a_{\bar{K}^0}^\dagger, \quad (7.65a)$$

$$Ca_{\pi^+}^\dagger C = a_{\pi^-}^\dagger, \quad (7.65b)$$

$$Ca_{\pi^0}^\dagger C = a_{\pi^0}^\dagger. \quad (7.65в)$$

Фазовые множители в формулах (7.65а) и (7.65б) считаются положительными по договоренности, так как относительные фазы состояний каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  и пионов  $\pi^+$  и  $\pi^-$  произвольны. Фазовый множитель в формуле (7.65в) — экспериментально наблюдаемая величина. Его нельзя изменить, условившись по-другому приписывать фазы частицами, так как в обеих частях формулы фигурирует одна и та же частица  $\pi^0$ . Отсюда следует, что пион  $\pi^0$  должен быть собственным состоянием оператора  $C$ , а соответствующее ему собственное значение можно экспериментально определить, исследуя процессы, в которых пионы  $\pi^0$  рождаются или уничтожаются, а  $C$ -четность сохраняется. Примером такого процесса может служить процесс распада  $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ , который подтверждает, что собственное значение оператора зарядового сопряжения действительно положительно, т. е. пион  $\pi^0$  является четным по отношению к операции зарядового сопряжения.

В нашей теории для простоты мы рассматриваем только нейтральные пионы и везде опускаем индексы, означающие электрические заряды. Заряженные пионы при распадах нейтральных каонов могут образовываться только в виде пар  $\pi^+\pi^-$ , причем операция зарядового сопряжения просто заменяет одну из этих заряженных частиц на другую. Но, если оба пиона, получившиеся при распаде каона, находятся в таком двухпионном состоянии, которое симметрично относительно перестановки обеих частиц, оператор  $C$  будет действовать на состояние пары заряженных пионов так же, как на соответствующее состояние пары нейтральных пионов. Именно так обстоит дело в отношении двухпионных распадов каонов, а также в отношении тех трехпионных распадов, в которых моменты количества движения всех пионов относительно центра масс равны нулю. В этих двух случаях наша теория, развитая для распада каонов на нейтральные пионы, остается справедливой также и для заряженных пионов.

Рассмотрим теперь обращение времени. Пусть  $\psi(t)$  будет решением временного уравнения Шредингера

$$H\psi(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t}. \quad (7.66a)$$

Проводя в этом уравнении замену  $t \rightarrow -t$ , получаем

$$H\psi(-t) = -i\hbar \frac{\partial \psi(-t)}{\partial t}. \quad (7.66б)$$

Следовательно, уравнение Шредингера (7.66а) неинвариантно относительно обращения времени.

Хотя сама функция  $\psi(-t)$  и не является решением уравнения Шредингера (7.66а), однако можно поставить вопрос: существует ли такое решение уравнения Шредингера (7.66а), которое физически эквивалентно функции  $\psi(-t)$ ? Под словами «физически экви-



валентно» мы подразумеваем, что это решение уравнения Шредингера дает те же значения для всех физически измеримых величин, как и функция  $\psi(-t)$ . Такому условию будет удовлетворять функция, получающаяся в результате умножения  $\psi(-t)$  на произвольный фазовый множитель, так как все фазовые множители сокращаются в расчетах вероятностей и экспериментально наблюдаемых матричных элементов эрмитовых операторов. Рассмотрим уравнение, комплексно сопряженное уравнению (7.66б):

$$H^* \psi^* (-t) = i\hbar \frac{\partial \psi^* (-t)}{\partial t}. \quad (7.66в)$$

Легко видеть, что функция  $\psi^* (-t)$  физически эквивалентна функции  $\psi(-t)$ , так как эти функции дают одни и те же значения вероятностей и одни и те же средние значения эрмитовых операторов. Кроме того, функция  $\psi^* (-t)$  является решением уравнения Шредингера (7.66а), если гамильтониан  $H$  действителен. Таким образом, мы можем определить оператор обращения времени  $T$  соотношением

$$T\psi(t) = \psi^* (-t), \quad (7.67а)$$

$$TAT^{-1} = A^*, \quad (7.67б)$$

где  $\psi(t)$  — произвольная функция, а  $A$  — произвольный оператор, не зависящий явно от времени.

Если гамильтониан  $H$  какой-то конкретной системы инвариантен относительно преобразования, задаваемого оператором  $T$ , то мы говорим, что он инвариантен относительно обращения времени. Это не означает, конечно, что уравнение Шредингера (7.66а) само инвариантно относительно обращения времени, а означает лишь, что существует такое решение уравнения Шредингера (7.66а), которое физически эквивалентно решению с обращенным временем. Если гамильтониан  $H$  не инвариантен относительно преобразования, задаваемого оператором  $T$ , то это не обязательно означает, что у нашей задачи нет решения, инвариантного относительно обращения времени: возможно, все же существует какое-то другое решение уравнения Шредингера (7.66а), отличающееся от решения (7.67) только фазовым множителем и физически ему эквивалентное. Для наших целей, однако, достаточно рассмотреть только оператор  $T$ , определяемый формулой (7.67а).

Формула (7.67а) содержит операцию комплексного сопряжения, поэтому оператор  $T$  не является линейным оператором; оператор  $T$  — «антилинейный» оператор, т. е. такой оператор, для которого

$$T(a\psi_1 + b\psi_2) = a^*T\psi_1 + b^*T\psi_2. \quad (7.68)$$

Антилинейные операторы обладают многими интересными свойствами. Например, собственные значения таких операторов определены с точностью только до произвольного фазового множителя, так как умножение собственного вектора на комплексное число изменяет фазу собственного значения.

Чтобы найти, как оператор  $T$  преобразует операторы рождения частиц в состояниях, описываемых плоскими волнами, обратимся к равенству

$$Te^{iq \cdot x} = (e^{iq \cdot x})^* = e^{-iq \cdot x}. \quad (7.69)$$

Из него видно, что обращение времени изменяет знак вектора импульса частицы, как этого и следовало ожидать. Таким образом, мы имеем соотношения

$$Ta_{\pi q}^\dagger |0\rangle = a_{\pi, -q}^\dagger |0\rangle, \quad (7.70a)$$

$$Ta_{Kq}^\dagger |0\rangle = a_{K, -q}^\dagger |0\rangle, \quad (7.70б)$$

откуда сразу вытекает, что

$$Ta_{\pi q}^\dagger T^{-1} = a_{\pi, -q}^\dagger, \quad (7.70в)$$

$$Ta_{Kq}^\dagger T^{-1} = a_{K, -q}^\dagger. \quad (7.70г)$$

Теперь у нас не возникает никакого особого «внутреннего» фазового множителя, как в случае операции четности, так как наш оператор  $T$  антилинейный.

Мы можем снова взять оператор  $R$  и рассмотреть оператор  $TR$ , который не будет изменять значений импульсов, лежащих в плоскости, перпендикулярной оси поворота, описываемого оператором  $R$ . Тогда мы получим

$$TRa_{\pi q}^\dagger RT^{-1} = a_{\pi q}^\dagger, \quad (7.71a)$$

$$TRa_{Kq}^\dagger RT^{-1} = a_{Kq}^\dagger. \quad (7.71б)$$

### § 11. CPT-инвариантность при распадах каонов

Посмотрим теперь, как ведет себя гамильтониан, описывающий распады каонов, при преобразованиях  $P$ ,  $C$  и  $T$ . Обобщим гамильтониан взаимодействия (7.24), включив в него, помимо операторных членов, описывающих распады каонов на два пиона, также операторные члены, описывающие распады каонов на три пиона; в результате будем иметь гамильтониан взаимодействия в виде

$$V = g_1 a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger a_{K^0} + g_2 a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger a_{\bar{K}^0} + g_3 a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger a_{K^0} + \\ + g_4 a_\pi^\dagger a_\pi^\dagger a_{\bar{K}^0} + \text{эрмит. сопр.} \quad (7.72)$$

Мы рассматриваем только распады на нейтральные пионы и опускаем в (7.72) для удобства рассуждений импульсные индексы, хотя учет импульсных переменных для трехпионных распадов (в отличие от двухпионных распадов) не тривиален. Импульсы трех пионов, возникающих в конечном состоянии, определяются законами сохранения импульса и энергии неоднозначно; конечное состояние принадлежит непрерывному спектру по импульсам. Если операторы рождения пионов снабдить импульсными индексами, то коэффициенты  $g_3$  и  $g_4$  надо будет считать нетривиальными функциями некоторых непрерывных переменных, описывающих спектр импульсов в конечном состоянии. Однако мы опускаем импульсные индексы частиц, так как при проверке инвариантности относительно преобразований  $P$ ,  $C$  и  $T$  мы будем проводить рассуждения с операторами  $PR$ ,  $C$  и  $TR$ , которые не изменяют значений импульсов.

Из инвариантности оператора  $V$  относительно поворотов в пространстве следует

$$RVR = V. \quad (7.73)$$

Из (7.63), (7.72) и (7.73) получаем

$$\begin{aligned} PVP = PRVRP = \\ = -g_1 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} - g_2 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + g_3 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + \\ + g_4 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + \text{эрмит. сопр.} \end{aligned} \quad (7.74a)$$

Из (7.65) имеем

$$\begin{aligned} CVC = g_1 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + g_2 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + g_3 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + \\ + g_4 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + \text{эрмит. сопр.} \end{aligned} \quad (7.74b)$$

И наконец, из (7.67) и (7.71) следует

$$\begin{aligned} TVT^{-1} = TRVRT^{-1} = \\ = g_1^* a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + g_2^* a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + g_3^* a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + \\ + g_4^* a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + \text{эрмит. сопр.} \end{aligned} \quad (7.74b)$$

Так как операторы  $PR$ ,  $C$  и  $TR$  не изменяют значений импульсов частиц, то полученные формулы останутся справедливыми и в том случае, когда зависимость от импульсов не будет включена в оператор взаимодействия (7.72). Тогда выписанные формулы будут справедливы для каждого отдельного операторного члена с фиксированными значениями импульсных переменных. Для каждой группы операторных членов, описывающих распад в заданной в пространстве плоскости, мы можем определить свой оператор  $R$

для этой конкретной плоскости. Тогда формула (7.73) для данной группы операторных членов будет иметь место, а значит, формулы (7.74) будут также справедливыми.

Из формулы (7.74а) видно, что преобразование пространственной инверсии изменяет знаки операторных членов, описывающих двухпионные распады и содержащих по нечетному числу бозонных операторов, и не изменяет знаки операторных членов, описывающих трехпионные распады и содержащих по четному числу бозонных операторов. Операция зарядового сопряжения приводит к замене всюду  $K^0$  на  $\bar{K}^0$  и  $\bar{K}^0$  на  $K^0$  [см. формулу (7.74б)]. Из формулы (7.74в) видно, что преобразование обращения времени изменяет каждый из коэффициентов  $g_i$  на комплексно сопряженный коэффициент  $g_i^*$ . Следовательно, указанные преобразования эквивалентны следующим преобразованиям коэффициентов  $g_i$ :

$$PVP \rightarrow g_1 \rightarrow -g_1, \quad g_2 \rightarrow -g_2, \quad g_3 \rightarrow g_3, \quad g_4 \rightarrow g_4, \quad (7.75a)$$

$$CVC \rightarrow g_1 \rightarrow g_2, \quad g_2 \rightarrow g_1, \quad g_3 \rightarrow g_4, \quad g_4 \rightarrow g_3, \quad (7.75б)$$

$$TVT^{-1} \rightarrow g_1 \rightarrow g_1^*, \quad g_2 \rightarrow g_2^*, \quad g_3 \rightarrow g_3^*, \quad g_4 \rightarrow g_4^*. \quad (7.75в)$$

Легко скомбинировать формулы (7.75) таким образом, чтобы получить соответствующие формулы для преобразований  $CP$  и  $CPT$ . Сначала рассмотрим преобразование, осуществляемое произведением операций  $C$  и  $P$ . Из (7.61) и (7.65) видно, что операции  $C$  и  $P$ , когда они преобразуют пионные и каонные операторы рождения, коммутируют друг с другом. (В общем случае это не имеет места, так как фермионы и зарядово сопряженные им антифермионы обладают противоположными четностями.) Таким образом, для бозонов можно написать

$$(CP)^{-1} = PC, \quad (7.76a)$$

а, следовательно,

$$(CPT)^{-1} = T^{-1}PC. \quad (7.76б)$$

Отсюда получаем

$$CPV (CP)^{-1} \rightarrow g_1 \leftrightarrow -g_2; \quad g_3 \leftrightarrow g_4, \quad (7.77a)$$

$$CPTV (CPT)^{-1} \rightarrow g_1 \leftrightarrow -g_2^*; \quad g_3 \leftrightarrow g_4^*. \quad (7.77б)$$

Требование инвариантности гамильтониана взаимодействия  $V$  относительно любого из указанных преобразований  $P$ ,  $C$  и  $T$  ограничивает выбор возможных значений коэффициентов  $g_i$  теми значениями, которые не меняются при действии соответствующего преобразования (7.75).

Условие сохранения пространственной четности требует инвариантности оператора  $V$  относительно преобразования (7.75а),

т. е. выполнения условия

$$PVP = P \rightarrow g_1 = g_2 = 0. \quad (7.78a)$$

Следовательно, двухпионные распады не сохраняют четность (и они не смогли бы происходить, если бы пространственная четность сохранялась). Трехпионные распады удовлетворяют условию сохранения четности, и поэтому на них закон сохранения четности не налагает никаких ограничений. Экспериментально наблюдаются как трехпионные, так и двухпионные распады, и это служит доказательством того, что четность при распадах каонов не сохраняется.

Если гамильтониан взаимодействия инвариантен относительно зарядового сопряжения, то должно выполняться условие

$$CVC = V \rightarrow g_1 = g_2; \quad g_3 = g_4. \quad (7.78б)$$

Здесь оказываются разрешенными как трехпионные, так и двухпионные распады, но коэффициенты взаимодействия будут такими, что будет разрешен только распад состояния  $K_2$  [см. (7.30б)], а не распад состояния  $K_1$ . Это, конечно, очевидное заключение, так как  $\pi^0$  является собственным состоянием оператора  $C$ , соответствующим собственному значению, равному  $+1$ . Поэтому состояние  $K_1$ , которое нечетно относительно преобразования  $C$ , никак не может распадаться на какое бы то ни было число  $\pi^0$ -мезонов, если имеет место  $C$ -инвариантность.

Экспериментально наблюдаются распады обоих состояний  $K_1$  и  $K_2$ , и это служит доказательством нарушения  $C$ -инвариантности.

Рассмотрим теперь  $CP$ -инвариантность. Если она имеет место, то выполняется условие

$$CPV(CP)^{-1} = V \rightarrow g_1 = -g_2; \quad g_3 = g_4. \quad (7.78в)$$

Здесь разрешены как двухпионные, так и трехпионные распады, но на два пиона может распадаться только состояние  $K_1$ , а на три пиона — только состояние  $K_2$ . Мы уже убедились в том, что пространственная четность не сохраняется в двухпионных распадах, поэтому неудивительно, если не будет  $C$ -инвариантности и  $CP$ -инвариантности для этих распадов.

Если  $CP$ -инвариантность имеет место и в то же время наблюдаются двухпионные распады, то условия (7.78а) и (7.78б), налагаемые одновременно на  $g_1$  и  $g_2$ , не выполняются, так как зарядовая четность  $C$  и пространственная четность  $P$  полностью, т. е. на 100%, не сохраняются в этом распаде. При наличии  $CP$ -инвариантности состояние  $K_1$  может распадаться только по двухпионной моде распада, а состояние  $K_2$  — только по трехпионной моде. Распады состояний  $K_1$  и  $K_2$  можно рассматривать независимо по временной теории возмущений. Скорости распадов состояний  $K_1$  и  $K_2$  или времена жизни обоих соответствующих состояний, мож-

но определить по формуле «золотого правила». При этом обе матрицы  $M$  и  $\Gamma$  из § 8 настоящей главы будут диагональны в базисе состояний  $K_1$  и  $K_2$ .

До 1964 г. считали, что все описанное выше согласуется с экспериментом. Действительно, экспериментально наблюдались два состояния  $K_1$  и  $K_2$  с временами жизни около  $10^{-10}$  и  $5 \cdot 10^{-8}$  с соответственно. Было обнаружено, что первое состояние распадается на два пиона, а второе — только на три пиона и по другим модам распада (на три и четыре частицы с присутствием лептонов).

В 1964 г. было обнаружено, однако, что долгоживущее состояние  $K_2$  может также распадаться на два пиона, хотя и довольно редко, с вероятностью порядка  $10^{-3}$ . Это послужило указанием на слабое нарушение  $CP$ -инвариантности в процессе распада. При таком нарушении теория, развитая в § 9 настоящей главы, остается справедливой, но матрица  $T$  теперь уже не будет диагональной, а ее собственными векторами будут состояния  $K_S$  и  $K_L$ , распадающиеся по экспоненциальному закону [см. (7.51a)]. Так как  $CP$ -инвариантность нарушается слабо, то эти состояния будут почти совпадать с собственными состояниями оператора  $CP$  [см. (7.30)].

Обратите внимание на то, что выведенное нами в § 3 настоящей главы условие, согласно которому конкретное состояние  $K_2$ , определяемое формулой (7.25б), не может распадаться на два пиона, остается все равно справедливым, так как при его выводе мы не использовали требование  $CP$ -инвариантности. Если известно, что каон находится в состоянии (7.25б) в заданный момент времени  $t$ , то в этот момент распад на  $2\pi$  произойти не может. Однако состояние каона изменится в результате распада на  $3\pi$  и через конечный промежуток времени в волновой функции, описывающей состояние каона, появится компонента  $K_1$  [см. (7.25a)], которая будет распадаться на два пиона. Точный закон изменения состояния каона со временем можно получить, разложив это состояние по базису  $K_S$  и  $K_L$  собственных векторов матрицы  $T$  [см. (7.51a)].

Инвариантность относительно обращения времени, т.е.  $T$ -инвариантность, и  $CPT$ -инвариантность приводят к следующим условиям для коэффициентов  $g_i$ :

$$TVT^{-1} = V \rightarrow g_1 = g_1^*; g_2 = g_2^*; g_3 = g_3^*; g_4 = g_4^*, \quad (7.79a)$$

$$CPTV(CPT)^{-1} = V \rightarrow g_1 = -g_2^*; g_3 = g_4^*. \quad (7.79б)$$

Если  $CP$ -инвариантность имеет место, то можно одновременно удовлетворить условиям  $T$ - и  $CPT$ -инвариантности, потребовав, чтобы все коэффициенты  $g_i$  были действительными величинами. Однако если  $CP$ -инвариантность нарушается, то либо нет  $T$ -инвариантности, либо нет  $CPT$ -инвариантности. Убедительного экс-

периментального решения этой дилеммы еще нет. Однако физики-теоретики предпочитают придерживаться мнения, что сохраняется  $CPT$ -инвариантность, но нет  $T$ -инвариантности, так как наличие  $CPT$ -инвариантности можно теоретически обосновать; она вытекает из некоторых общих положений квантовой теории поля.

Обратите внимание, что если  $T$ -инвариантность, т. е. инвариантность относительно обращения времени, имеет место, а нарушаются  $CP$ - и  $CPT$ -инвариантности, то либо  $|g_1| \neq |g_2|$ , либо  $|g_3| \neq |g_4|$ . Тогда мы получаем, что массовый оператор (7.43б) имеет в базисе состояний  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  не равные друг другу диагональные матричные элементы (т. е. массы каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  различны). Так как разность собственных значений матрицы размерности  $2 \times 2$  всегда больше, чем разность ее диагональных элементов, то, следовательно, экспериментально наблюдаемая разность масс каонов  $K_1$  и  $K_2$  дает верхний предел разности масс каонов  $K^0$  и  $\bar{K}^0$ , а значит, и верхний предел степени нарушения  $CPT$ -инвариантности при распадах каонов.

### Задачи

1. В изоспиновом формализме пион описывается как изотопический триплет с изоспином  $T = 1$ .

Пусть  $a_{\pi m q}^{\dagger}$  означает оператор рождения пиона с импульсом  $\hbar q$  и электрическим зарядом, определяемым значением изоспинового квантового числа  $m$ . Для  $\pi^+$ ,  $\pi^0$ - и  $\pi^-$ -мезонов имеем  $m = +1$ ,  $0$  и  $-1$  соответственно. Квантовое число  $m$  равно собственному значению « $z$ -компоненты» изоспина, причем изоспины складываются так же, как моменты количества движения.

а) Какие значения полного изоспина  $T$  могут иметь состояния двухпионной системы?

б) Выпишите в явном виде в формализме вторичного квантования волновую функцию, описывающую состояние системы из двух пионов с нулевым полным импульсом и нулевым полным электрическим зарядом, являющуюся собственной функцией оператора полного изоспина  $T$  с собственным значением  $T = 0$ . Предположите, что относительное движение двух пионов описывается произвольной волновой функцией  $f(q)$ .

в) Решите задачу из п. «б» для всех остальных собственных значений оператора  $T$ , которыми может обладать система из двух пионов.

г) Используя коммутационные соотношения для операторов рождения и свойства симметрии коэффициентов Клебша — Гордана, найдите те ограничения, которые налагаются на значения четности и момента количества движения для состояний двухпионной системы, рассмотренных в п. «б» и «в».

2. Мезоны  $\rho$ ,  $\omega$ ,  $\eta$  и  $\pi$  обладают следующими свойствами:

мезон  $\rho$  — спин  $S = 1$ , четность отрицательная, изоспин  $T = 1$ ;

мезон  $\omega$  — спин  $S = 1$ , четность отрицательная, изоспин  $T = 0$ ;

мезон  $\eta$  — спин  $S = 0$ , четность отрицательная, изоспин  $T = 0$ ;

мезон  $\pi$  — спин  $S = 0$ , четность отрицательная, изоспин  $T = 1$ .

а) Какие из частиц  $\rho$ ,  $\omega$  или  $\eta$  могут распадаться на два пиона с сохранением полного момента количества движения и изоспина?

б) Какие из частиц  $\rho$ ,  $\omega$  или  $\eta$  могут распадаться на два пиона с сохранением полного момента количества движения и четности?

в) Какая из частиц  $\rho$ ,  $\omega$  или  $\eta$  может распадаться на два пиона с сохранением полного момента количества движения, четности и изоспина?

г) Пусть  $a_{\eta q}^\dagger$  означает оператор рождения  $\eta$ -мезона в состоянии с импульсом  $\hbar q$ . Так как  $\eta$ -мезон нейтральный, являющийся изотопическим синглетом с  $T = 0$ , то для него вводить изотопический индекс нет необходимости. Составьте и выпишите выражение для оператора взаимодействия, ответственного за распад  $\eta$ -мезона на два пиона и сохраняющего импульс и изоспин системы. Сделайте этот оператор взаимодействия эрмитовым. Какой из законов сохранения нарушается при таком взаимодействии?

3. а. Пусть  $a_{\pi t q \theta \phi}^\dagger$  означает оператор рождения пиона в состоянии с импульсом, равным по абсолютной величине  $\hbar q$  и имеющим направление, которое задается углами  $\theta$ ,  $\phi$ . Запишите волновую функцию системы из двух пионов с полным импульсом, равным нулю, и полным моментом количества движения, равным  $L$ .

б. Пусть  $a_{\rho m s 0}^\dagger$  означает оператор рождения  $\rho$ -мезона в состоянии с проекцией изоспина  $m$ , проекцией обычного спина  $s$  и с полным импульсом, равным нулю. Разрешенные значения проекции обычного спина  $s$  равны 1, 0 и  $-1$ , так как обычный спин  $\rho$ -мезона равен 1. Составьте выражение для оператора взаимодействия, ответственного за распад покоящегося  $\rho$ -мезона на два пиона и сохраняющего импульс, момент количества движения и изоспин.

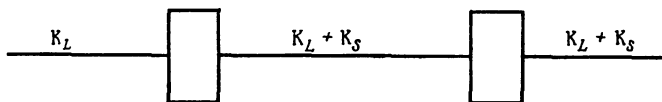
4. Рассмотрите пучок каонов, который первоначально содержит только каоны, находящиеся в состоянии  $K_2$  (т. е. считайте, что в пучке все каоны в состоянии  $K_1$  уже распались). Пусть этот пучок проходит через тонкий слой вещества, в котором поглощается 30% каонов  $\bar{K}^0$ . Предположите, что спустя промежуток времени  $t_1$  пучок вновь проходит сквозь такой же в точности поглотитель. Найдите интенсивность компоненты  $K_1$  в пучке после



прохождения им второго поглотителя и представьте ее как функцию времени  $t_1$ . Покажите, что этот физический эффект можно использовать для экспериментального определения значения разности масс  $K_1$  и  $K_2$ , и опишите в общих чертах, какой должна быть экспериментальная установка.

5. Считайте, что пучок нейтральных каонов пропускается через две одинаковые пластинки (фиг. 7.4) из какого-нибудь вещества, расположенные друг от друга на расстоянии  $d$  (порядка нескольких сантиметров).

Если первоначально пучок каонов состоял из долгоживущих каонов в состоянии  $K_L$ , то он может превратиться в пучок короткоживущих каонов, находящихся в состоянии  $K_S$ , после взаимодействия с атомными ядрами вещества в каждой из двух пластинок. Амплитуда конечного состояния  $K_S$  является суммой двух



Фиг. 7.4.

компонент, отвечающих двум возможностям: произошел ли переход  $K_L \rightarrow K_S$  в первой пластинке или во второй. Разность фаз этих двух компонент зависит от расстояния  $d$  и от значения разности масс каонов  $K_L$  и  $K_S$ . Для измерения разности масс обычно используются интерференционные эксперименты.

Обе указанные компоненты будут когерентны и смогут интерферировать только в том случае, если не известно, в какой из двух пластинок произошел квантовый переход. Однако можно возразить: вследствие отличной от нуля разности масс каонов  $K_L$  и  $K_S$  этот квантовый переход должен сопровождаться обменом импульсом и энергией между каоном и пластинкой и поэтому, измеряя импульсы пластинок до и после прохождения сквозь них каона, можно было бы, казалось, указать, какой из них был передан импульс.

Покажите, рассуждая по аналогии с тем, как мы рассуждали в отношении эффекта Мессбауэра, что указанное соображение о передаче импульса не мешает когерентности и что квантовая интерференция будет наблюдаться.

6. Рассмотрите гамильтониан  $H$  для одного типа каонов и одного типа пионов с оператором взаимодействия, ответственным за распад каонов:

$$V = \sum_{q'q''} g(q', q'') a_{\pi}^{\dagger} a' - q'' a_{\pi}^{\dagger} a' + q'' a_{\pi} a_{K, 2q'} + \text{эрмит. сопр.},$$

где  $g(0, q'')$  зависит только от модуля вектора  $q''$  и не зависит от его направления.

Найдите какие-нибудь собственные функции полного гамильтониана  $H$ , описывающие стационарные состояния. [Указание. Найдите собственные функции невозмущенного гамильтониана  $H_0$ , которые переходят сами в себя при действии оператора взаимодействия  $V$  и которые поэтому будут также собственными функциями и полного гамильтониана. Как физически интерпретировать эти собственные функции?]

7. Рассмотрите гамильтониан  $H$  для системы из двух типов нейтральных каонов и учтите возможность распадов каонов как на два, так и на три пиона, т. е. возьмите оператор взаимодействия

$$V = g_1 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + g_2 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + g_3 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{K^0} + \\ + g_4 a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\bar{K}^0} + \text{эрмит. сопр.}$$

Опустите импульсные индексы и считайте, что для каждого типа частиц возможно только по одному состоянию. Считайте, что общее решение временного уравнения Шредингера имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = \alpha(t) a_{K^0}^{\dagger} |0\rangle + \beta(t) a_{\bar{K}^0}^{\dagger} |0\rangle + \gamma(t) a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} |0\rangle + \delta(t) a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} |0\rangle.$$

Посмотрите, существует ли решение «с обращенным временем» для данного уравнения Шредингера. Это такое решение, для которого вероятности обнаружить каон  $K^0$ , каон  $\bar{K}^0$ , два пиона и три пиона изменяются во времени и определяются функциями, получающимися при замене  $t \rightarrow -t$  из функций, которыми характеризуются вероятности, определяемые приведенной выше волновой функцией (как если бы фильм, демонстрирующий приведенную выше волновую функцию, «прокручивался» в обратную сторону). Таким образом, волновая функция с обращенным временем

$$|\psi_{\text{обр. вр.}}(t)\rangle = \alpha'(t) a_{K^0}^{\dagger} |0\rangle + \beta'(t) a_{\bar{K}^0}^{\dagger} |0\rangle + \\ + \gamma'(t) a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} |0\rangle + \delta'(t) a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} a_{\pi}^{\dagger} |0\rangle$$

определяется условиями

$$|\alpha'(t)|^2 = |\alpha(-t)|^2; \quad |\beta'(t)|^2 = |\beta(-t)|^2; \\ |\gamma'(t)|^2 = |\gamma(-t)|^2; \quad |\delta'(t)|^2 = |\delta(-t)|^2.$$

Покажите, что если  $g_3 = g_4 = 0$ , т. е. если единственной разрешенной модой распада каонов является распад на два пиона, то решение с обращенным временем всегда существует.

Какие условия надо наложить на  $g_1, g_2, g_3$ , чтобы существовало решение с обращенным временем?

8. Составьте феноменологический гамильтониан для системы из пионов и фотонов, в которой могут происходить распады пионов на пары фотонов. Выразите время жизни пиона через параметры, являющиеся коэффициентами при операторных членах в гамильтониане.

9. Обобщите теорию распада каонов на пары пионов, развитую в § 1 и 2 настоящей главы, включив в рассмотрение начальные состояния, в которых есть пионы.

Посмотрите, какие изменения необходимо внести в формулы (7.8) — (7.20), если заменить вакуумное состояние  $|0\rangle$  в формуле (7.8а) на многопионное состояние

$$|0\rangle \rightarrow \prod_{q_x > 0} (a_{\pi q}^\dagger)^{n_q} |0\rangle, \quad (1)$$

в котором имеется по  $n_q$  пионов в состояниях с импульсом  $\hbar q$ , причем берутся только такие состояния, у которых  $x$ -компонента импульса  $q$  положительна. В частности, сделайте следующее:

а) Взяв начальные условия (7.8б) и (7.8в), покажите, как надо изменить формулы (7.9), (7.15), (7.16), (7.17), (7.19) и (7.20), когда в волновой функции (7.8а) сделана указанная выше замена (1).

б) Выясните, как по-новому физически интерпретировать вероятность перехода в единицу времени, даваемую формулой (7.20а), когда имеются пионы в начальном состоянии.

в) Сказывается ли изменение в физической интерпретации формулы (7.20а) в п. «б» на формуле для вероятности распада каонов? Можно ли это различие обнаружить в лаборатории, используя имеющуюся в настоящее время экспериментальную технику?

г) Можете ли вы придумать другой пример процесса распада, для которого наличие многих пионов в начальном состоянии было бы важно?

д) Что изменилось бы, если бы в начальном состоянии присутствовали пионы, имеющие все возможные значения  $q$ , т. е. и такие, для которых компонента  $q_x$  отрицательна?

10. Постройте теорию излучения  $\gamma$ -квантов ядром, находящимся в возбужденном состоянии, аналогичную теории распада каонов. Обозначьте через  $E_g$  полную энергию данного ядра, находящегося в основном внутреннем состоянии и в покое. Обозначьте через  $E_e$  энергию этого ядра, когда оно находится в каком-то заданном внутреннем возбужденном состоянии и тоже покоится. Пренебрегите всеми остальными внутренними состояниями этого атомного ядра. Пусть  $a_{ek}^\dagger$  и  $a_{gk}^\dagger$  обозначают операторы рождения ядра соответственно в возбужденном и в основном внутренних состояниях и в состоянии с полным импульсом, равным  $\hbar k$ . Пусть

$b_k^\dagger$  означает оператор рождения фотона с импульсом  $\hbar k$ . Пренебрегите поляризационными состояниями фотона и считайте спины состояний ядра равными нулю, т. е. предположите, что у ядра имеется только одно возбужденное и одно основное состояния с импульсом  $\hbar k$ .

а) Выпишите явно во вторично квантованном виде гамильтониан системы, составленной из некоторого числа атомных ядер, находящихся в возбужденном состоянии и в основном состоянии, и некоторого числа фотонов. Предположите, что ядра и фотоны никак не взаимодействуют друг с другом.

б) Выпишите во вторично квантованном виде оператор взаимодействия, описывающий переходы атомных ядер из возбужденного состояния в основное с излучением фотона. Сделайте этот оператор взаимодействия эрмитовым, но во всех остальных отношениях считайте, что вы имеете взаимодействие самого общего вида (т. е. не учитывайте ограничений, налагаемых законами сохранения). Какой еще процесс описывает этот оператор взаимодействия, кроме процесса перехода ядра из возбужденного состояния в основное с излучением фотона?

в) Какое ограничение надо наложить на вид оператора взаимодействия из п. «б», чтобы согласовать его с требованиями закона сохранения импульса? Нужно ли что-либо предпринимать, чтобы выполнялся закон сохранения энергии?

г) Возьмите состояние, в котором в момент времени  $t = 0$  имеется одно ядро, находящееся в возбужденном состоянии и обладающее нулевым полным импульсом, и в котором нет ядер, находящихся в основном состоянии, и нет фотонов. Составьте правильное выражение для зависящей от времени волновой функции, совпадающей при  $t = 0$  с волновой функцией этого состояния в первом порядке теории возмущений. Какой вид имеет формула для вероятности излучения фотона в единицу времени?

д) Как изменится формула для вероятности перехода, полученная в п. «г», если считать, что ядро в начальный момент времени находилось в состоянии с таким полным импульсом  $\hbar k$ , при котором скорость ядра была значительно меньше скорости света? Другими словами, какие дополнительные ограничения надо наложить на параметры, являющиеся коэффициентами при операторных членах в гамильтониане взаимодействия, рассмотренного в п. «г», если считать, что ядра обладают существенно нерелятивистскими скоростями?

е) Предположите, что ядро не свободно, а «привязано» к началу координат гармоническим осцилляторным потенциалом  $V = \frac{1}{2} M \omega^2 x^2$ , где  $x$  — координата центра масс ядра. Запишите этот потенциал в формализме вторичного квантования, обозначая через  $\langle k | V | k' \rangle$  матричные элементы осцилляторного потенциала

в импульсном представлении. Считайте, что на ядро действует один и тот же потенциал независимо от того, находится ли оно в возбужденном или в основном внутреннем состоянии.

ж) Рассмотрите систему, описываемую гамильтонианом, который получен в п. «б» и «в» и к которому добавлен еще потенциал, введенный в п. «е». Упростите этот гамильтониан, перейдя к новым операторам рождения  $a_{en}^\dagger$  и  $a_{gn}^\dagger$ . Эти операторы рожают ядро в возбужденном или в основном внутреннем состоянии, находящееся, кроме того, в  $n$ -м возбужденном состоянии потенциала гармонического осциллятора (а не в свободном состоянии, описываемом плоской волной).

з) Как спектр энергий  $\gamma$ -квантов, испущенных ядром в ситуации, описанной в п. «ж», отличается от спектра энергий  $\gamma$ -квантов, испущенных свободным ядром, т. е. при отсутствии потенциала гармонического осциллятора? Пренебрегите естественной шириной линии.

# ***V. Теория рассеяния в изложении для пешеходов***

## ***Введение***

Гл. 8 посвящена физическим основам квантовомеханической теории рассеяния и ее математическим приемам; рассматривается исключительно одномерная задача рассеяния. В одномерном случае все обстоит проще, так как имеется только два направления, по которым частица может рассеиваться: направление «вперед» и направление «назад». Здесь нет континуального множества углов рассеяния, как в трехмерной задаче. Гамильтониан в одномерном случае имеет только двукратное, а не бесконечнократное вырождение. Таким образом, одномерное рассеяние для каждой заданной энергии можно описать с помощью простого двумерного векторного пространства, а не бесконечномерного пространства, которое необходимо рассматривать в теории трехмерного рассеяния. Здесь  $S$ - и  $T$ -матрицы оказываются матрицами размерности  $2 \times 2$ , а не матрицами бесконечного порядка. Матрицы размерности  $2 \times 2$  вовсе не тривиальны: они позволяют прекрасно проиллюстрировать многие физические моменты трехмерной теории рассеяния и тем самым устраняют необходимость возиться с бесконечными матрицами. Например, в трехмерной теории рассеяния рассматривают потенциал, который обладает симметрией относительно поворотов в трехмерном пространстве. Такой потенциал «выглядит» одинаково с «любого направления», и это позволяет нам разбить задачу решения уравнения Шредингера на бесконечное число более простых задач по определению «парциальных» волн. (Последние никак не связаны между собой, так как ведут себя по-разному при пространственных поворотах.) В одномерной теории рассеяния мы имеем аналогичную ситуацию: мы можем использовать симметрию потенциала относительно отра-

жения в начале координат, если этот потенциал «выглядит» одинаково с обоих возможных в одномерном случае «направлений», и это позволяет разбить задачу решения уравнения Шредингера на две задачи по отысканию двух независимых парциальных волн. Последние никак не связаны друг с другом, так как по-разному ведут себя при пространственном отражении.

Изложение в гл. 8 мы начинаем с построения в § 1—4 теории парциальных волн и сдвигов фаз, даем определение амплитуды рассеяния и  $S$ -матрицы в двумерном векторном пространстве, причем амплитуду рассеяния рассматриваем как функцию особой двузначной «угловой» переменной. Затем в § 5 развиваемую теорию мы обобщаем на случай «многоканального» рассеяния, для чего вводим в рассмотрение дополнительную степень свободы рассеиваемых частиц (таковой, например, является электрический заряд частицы в разбираемой в этом параграфе задаче рассеяния каонов на нуклонах, в которой учитывается возможность передачи заряда от одной частицы к другой). Мы используем при этом изоспиновую симметрию, позволяющую сразу найти удобные полные наборы парциальных волн и сдвигов фаз. Затем в § 6 занимаемся точным решением конкретной задачи для «дельта-потенциала», чтобы показать читателю, как надо пользоваться методом сдвигов фаз, а также обсуждаем интересные свойства амплитуды рассеяния. В § 7 мы рассказываем об *аналитических* свойствах амплитуды рассеяния и, в частности, показываем, какая имеется взаимосвязь между полюсами амплитуды рассеяния и физическими связанными состояниями системы и ее резонансами и как вообще связано аналитическое поведение амплитуды рассеяния со свойством сохранения вероятности в квантовой механике. Задачи с «одинарным» и «двойным» дельта-потенциалами легко решаются непосредственно. В § 8 мы занимаемся задачей с двойным дельта-потенциалом. Далее, в § 9 рассматриваем простой пример неупругого рассеяния, когда рассеиватель имеет два внутренних состояния. Точное решение этой задачи, полученное для дельта-потенциала, позволяет проиллюстрировать общее соотношение, имеющее место между амплитудой неупругого рассеяния и *комплексными* сдвигами фаз. Два полюса у этой амплитуды рассеяния соответствуют двум связанным состояниям в дельта-потенциале, когда рассеиватель находится в своем «основном» или «возбужденном» состоянии. Второе связанное состояние будет устойчивым, когда энергия связи больше энергии возбуждения возбужденного состояния рассеивателя. В противном случае мы будем иметь «резонанс», который может распадаться на рассеиватель в основном состоянии и свободную частицу. Соответствующий полюс амплитуды рассеяния будет иметь мнимую часть, величина которой дает «ширину» резонанса; она в свою очередь в точности равна ширине, получаемой по формуле «золотого правила» временной теории

возмущений. В § 10 мы рассматриваем другой пример резонансного рассеяния, а именно одномерное рассеяние пионов на пионах, вызываемое тем взаимодействием, которое уже использовалось нами раньше в гл. 7 при описании процессов распада каонов. Вторично квантованный гамильтониан из гл. 7 мы преобразуем в § 10 таким образом, чтобы из него получить уравнение Шредингера для одной движущейся в дельта-потенциале частицы с «приведенной» массой. Решая это уравнение методом сдвигов фаз, мы получаем лоренцеву форму резонансной кривой для амплитуды рассеяния.

Применение формальной теории возмущений к одномерному рассеянию позволяет выявить те специфические трудности, которые возникают в теории возмущений, используемой в теории рассеяния, и которых нет в невременной теории возмущений (т. е. в теории возмущений, развитой для изучения дискретных связанных состояний). Неоднозначность и парадоксы возникают потому, что используются *ненормируемые* волновые функции, а также потому, что нельзя дать однозначного ответа на вопрос: какое решение точной задачи рассеяния соответствует данному решению невозмущенного уравнения Шредингера? От этой неопределенности можно избавиться, если потребовать, чтобы искомого решение удовлетворяло граничному условию наличия в нем только «расходящейся» волны, кроме невозмущенной «падающей» волны. Тогда легко можно развить формальную теорию с использованием  $T$ -матрицы, функций Грина и борновского ряда (§ 11 и 12).

В § 13—15 данной главы неортодоксальным способом решается задача о движении частицы в одномерном периодическом потенциале; автор надеется, что его изложение окажется полезным при преподавании *элементарных* курсов физики твердого тела. «Зонную структуру» энергетического спектра мы вводим очень просто, вообще не делая никаких приближений, так как для симметричного относительно отражения в начале координат потенциала самого общего вида используется метод сдвигов фаз. Наше изложение задачи о движении частицы в периодическом одномерном потенциале по сравнению с общепринятым имеет то существенное преимущество, что мы параметризуем все важные для нас свойства потенциала *с помощью одних только сдвигов фаз*. Условие существования требуемого решения уравнения Шредингера можно представить тогда определенным соотношением, в которое входят косинусы некоторых переменных. *Запрещенные* энергетические зоны появляются всякий раз, когда, согласно этому условию, требуется, чтобы какой-нибудь косинус был бы больше единицы.

В § 15 рассматриваемая одномерная задача обобщается: не требуется, чтобы потенциал был строго периодическим, и предполагается, что каждый узел решетки может смещаться из своего положения равновесия и эти смещения можно рассматривать как



новые *динамические* переменные. Так мы приходим к одномерной модели кристалла, которая после преобразования к «нормальным координатам» описывает блоховские электроны и фононы и в которой «электрон-фононное» взаимодействие имеет вид феноменологического взаимодействия из гл. 4. Рассеяние электронов на электронах и фононов на электронах в этой одномерной модели позволяет продемонстрировать особенности закона сохранения импульса для кристаллической решетки.

## Глава 8. ОДНОМЕРНОЕ РАССЕЯНИЕ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

### § 1. Одномерная задача рассеяния

В любом эксперименте по рассеянию частицы пучка рассеиваются мишенью, и затем эти рассеянные частицы детектируются. Взаимодействие между пучком и мишенью происходит в очень малом объеме пространства. Область, в которой данный пучок приготавливается, и область, в которой рассеянный пучок детектируется, расположены очень далеко от области взаимодействия пучка с мишенью, так что можно смело предполагать, что и в начальном и в конечном состояниях частицы пучка ведут себя как свободные. Процессы рассеяния, следовательно, — это процессы перехода данной частицы из одного свободного состояния в другое в результате взаимодействия, которое проявляется только в очень малом объеме. Эта постановка основной задачи теории рассеяния хорошо иллюстрируется на примере следующей одномерной задачи.

Рассмотрим одну частицу массы  $m$ , имеющую импульс  $p$  и движущуюся свободно в одном измерении. Ее гамильтониан имеет вид

$$H_0 = p^2/2m. \quad (8.1)$$

Импульс  $p$  коммутирует с  $H_0$ . Следовательно, операторы  $H_0$  и  $p$  одновременно можно диагонализировать. Их собственными функциями будут плоские волны, т. е.

$$\psi_k = e^{ikh} \quad (8.2a)$$

$$p\psi_k = \hbar k\psi_k \quad (8.2b)$$

$$H_0\psi_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m}\psi_k \quad (8.2в)$$

Энергетический спектр непрерывен и двукратно вырожден, так как собственные значения (8.2в) зависят только от абсолютной величины и не зависят от знака  $k$ . Любая линейная комбинация вырожденных собственных функций  $\psi_k$  и  $\psi_{-k}$  будет тоже собственной функцией, т. е. всегда можно построить собственную функцию

$$A\psi_k + B\psi_{-k} = Ae^{ikh} + Be^{-ikh} \quad (8.3a)$$

и, в частности, функцию

$$\Phi_k = \sin(kx + \delta), \quad (8.36)$$

где  $A$ ,  $B$  и  $\delta$  — некоторые постоянные.

Собственные функции импульса (8.2а) описывают бегущие волны. Функция (8.3а) есть линейная комбинация двух волн, бегущих в противоположных направлениях. Функция (8.3б) описывает стоячую волну.

Гамильтониан (8.1) инвариантен относительно отражения в начале координат. Оператор четности  $P$  поэтому коммутирует с ним, и можно найти полную систему одновременных собственных функций операторов  $H$  и  $P$ . Собственные функции с четной и нечетной четностями соответственно имеют вид

$$\psi_{k0} = \cos kx, \quad (8.4a)$$

$$\psi_{k1} = \sin kx, \quad (8.4b)$$

причем для них

$$P\psi_{k0} = \psi_{k0}, \quad (8.5a)$$

$$P\psi_{k1} = -\psi_{k1}. \quad (8.5b)$$

Добавим теперь к гамильтониану (8.1) потенциал  $V$ , и пусть он отличен от нуля только в конечной области, ограниченной значением  $|x| = X$ , т. е. рассмотрим гамильтониан

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (8.6a)$$

причем

$$V(x) = 0 \quad \text{при} \quad |x| > X. \quad (8.6b)$$

Спектр собственных значений при  $E \geq 0$  не изменится от добавления потенциала  $V$ . Он все равно останется непрерывным и двукратно вырожденным. Кроме того, вид собственных функций при  $E \geq 0$  тоже не изменится в области, не занятой потенциалом. Всегда можно найти собственные функции, которые ведут себя как любая из собственных функций (8.2а), (8.3) и (8.4б) при  $x > X$ , а также и при  $x < -X$ . Мы пока что не знаем, как связать эти волновые функции, рассматриваемые отдельно в положительной и отрицательной областях. Скажем, волновая функция, которая имеет вид (8.2а) при  $x > X$ , должна быть некоторой линейной комбинацией вида (8.3а) в области  $x < -X$ , но а priori мы не знаем, какая именно это линейная комбинация. Она определяется формой потенциала  $V$ .

Пусть  $\psi^{(+)}(x)$  — некоторая собственная функция гамильтониана  $H$ , которая имеет вид (8.2а), т. е. вид одиночной плоской волны при  $x > X$ :

$$\psi^{(+)}(x) = S e^{ikx} \quad \text{при } x > X, \quad (8.7a)$$

причем  $S$  — некоторый числовой коэффициент. Тогда при  $x < -X$  эта собственная функция должна иметь вид (8.3а), т. е.

$$\psi^{(+)}(x) = e^{ikx} + R e^{-ikx} \quad \text{при } x < -X, \quad (8.7b)$$

где  $R$  — тоже некоторый числовой коэффициент. Нормировку нашей собственной функции мы берем такой, чтобы коэффициент при первом слагаемом в (8.7б) равнялся точно единице. Рассматриваемая собственная функция (8.7) имеет очень простой физический смысл. При  $x < -X$  в нее входят волны, бегущие в обоих направлениях, а при  $x > X$  она содержит только «расходящуюся» волну, движущуюся направо. Первое слагаемое в правой части (8.7б) можно рассматривать как «падающую» волну, а второе — как «отраженную» волну; волновую функцию (8.7а) надо поэтому считать просто «прошедшей» волной. Величины  $R$  и  $S$  — коэффициенты отражения и прохождения для данного потенциала  $V$ . Их можно найти, явным образом решая уравнения Шредингера на всей прямой, включая занятую потенциалом область.

## § 2. Симметрии отражения и поворотов и сдвиги фаз

Предположим, что наш потенциал инвариантен относительно отражения, т. е.

$$V(x) = V(-x) \quad (8.8a)$$

и

$$[P, V] = 0. \quad (8.8b)$$

Тогда гамильтониан (8.6) и оператор четности  $P$  можно одновременно диагонализировать, и это позволит построить четные и нечетные решения, являющиеся стоячими волнами. Последние можно записать в следующем удобном виде:

$$\psi_0 = \cos(kx + \delta_0) \quad \text{при } x > X, \quad \psi_0 = \cos(kx - \delta_0) \quad \text{при } x < -X, \quad (8.9a)$$

$$\psi_1 = \sin(kx + \delta_1) \quad \text{при } x > X, \quad \psi_1 = \sin(kx - \delta_1) \quad \text{при } x < -X. \quad (8.9b)$$

Эти состояния отличаются от соответствующих собственных состояний с определенной четностью (8.4) наличием так называемых сдвигов фаз  $\delta_0$  и  $\delta_1$ . Значения этих сдвигов фаз характеризуются видом потенциала  $V$ , а их можно найти, если явным образом решить уравнение Шредингера.

Легко построить специальную линейную комбинацию собственных состояний четности (8.9), имеющую вид

$$\psi^{(+)} = e^{+i\delta_0}\psi_0 + ie^{+i\delta_1}\psi_1 = \frac{1}{2}(e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1})e^{ikx} \quad \text{при } x > X, \quad (8.10a)$$

$$= e^{ikx} + \frac{1}{2}(e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_1})e^{-ikx} \quad \text{при } x < -X \quad (8.10b)$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2}(e^{2i\delta_0} + e^{2i\delta_1}) = \frac{1}{2}[(e^{2i\delta_0} - 1) + (e^{2i\delta_1} - 1)] + 1 = \\ &= 1 + \sum_{l=0, 1} ie^{i\delta_l} \sin \delta_l, \end{aligned} \quad (8.11a)$$

$$\begin{aligned} R &= \frac{1}{2}(e^{2i\delta_0} - e^{2i\delta_1}) = \frac{1}{2}[(e^{2i\delta_0} - 1) - (e^{2i\delta_1} - 1)] = \\ &= \sum_{l=0, 1} i(-1)^l e^{i\delta_l} \sin \delta_l. \end{aligned} \quad (8.11b)$$

Отсюда видно, что коэффициенты отражения и прохождения полностью определяются, если известны величины сдвигов фаз четного и нечетного решений.

Выразим теперь все полученные результаты на другом языке, который более удобен при проведении обобщений формул одномерной теории на физический трехмерный случай. На одномерную симметрию потенциала при отражении в начале координат [см. (8.8a)] мы можем посмотреть и как на инвариантность его при повороте на угол  $180^\circ$  вокруг оси, перпендикулярной оси  $x$ . Мы получим естественное обобщение в трехмерном случае этой простой инвариантности, если рассмотрим полную инвариантность относительно произвольных поворотов в трехмерном пространстве. Так как самыми удобными координатами при обсуждении инвариантности относительно пространственных поворотов в трехмерном пространстве являются «сферические полярные координаты», то наши одномерные формулы будет легко обобщить на случай трех измерений, если мы запишем их с помощью «одномерных полярных координат». Определим эти координаты следующим образом:

$$r = |x|, \quad (8.12a)$$

$$\theta = 0, \text{ если } x > 0, \text{ и } \theta = \pi, \text{ если } x < 0. \quad (8.12b)$$

В одномерном случае  $\theta$  имеет только два значения 0 и  $\pi$  соответственно для направлений «вперед» и «назад». Рассматривая зависимость волновых функций и процесса рассеяния от этой двузначной угловой переменной, мы сразу же глубоко проникаем в понимание зависимости функций от углов в трехмерном случае.

В задачах трехмерного рассеяния часто одновременно используют и декартовы и сферические полярные координаты, когда выписывают волновую функцию в виде линейной комбинации падающей плоской волны и расходящейся сферической волны. Волновую функцию (8.7) можно тоже записать в виде одной формулы, если воспользоваться нашими одномерными полярными координатами (8.12), т. е.

$$\psi^{(+)}(x) = e^{ikx} + g(\theta) e^{ikr} \quad \text{при } r > x, \quad (8.13a)$$

причем

$$g(0) = S - 1, \quad (8.13б)$$

$$g(\pi) = R. \quad (8.13в)$$

Первое слагаемое  $e^{ikx}$  в (8.13a) присутствует не только при  $x < -X$ , но также и при  $x > X$ . Оно описывает, следовательно, не только сходящуюся падающую волну, но также и расходящуюся волну; оно было бы полным решением уравнения Шредингера при отсутствии потенциала. Оба слагаемых в волновой функции (8.13a), таким образом, описывают невозмущенную падающую волну, являющуюся точным решением уравнения Шредингера при отсутствии потенциала, и рассеянную волну, происхождение которой обязано целиком потенциалу. Функция  $g(\theta)$  описывает «зависимость от угла» амплитуды рассеяния.

Разделение волновой функции на невозмущенную и рассеянную волны отлично от разделения в формуле (8.7) на сходящуюся и расходящуюся волны, так как расходящаяся волна включает в себя вклад от падающей волны, прошедшей через потенциал. Это различие между двумя описаниями проявляется в наличии дополнительного слагаемого в выражении (8.13б), связывающем амплитуду рассеяния вперед  $g(0)$  с коэффициентом прохождения  $S$ . Такого дополнительного слагаемого нет в выражении (8.13в), связывающем амплитуду рассеяния назад  $g(\pi)$  с коэффициентом отражения  $R$ .

Оба указанных альтернативных способа описания волновой функции одинаково полезны в теории рассеяния. Разбиение на расходящуюся и сходящуюся волны удобно при обсуждении условия сохранения вероятности, которое требует, чтобы ток вероятности, приносимый сходящейся волной, был равен току, уносимому расходящейся волной. Разбиение на невозмущенную волну и рассеянную волну полезно, когда мы хотим применить в теории рассеяния теорию возмущений; тогда начинают с невозмущенной волны, берущейся в качестве решения нулевого приближения, и вычисляют рассеянную волну методом последовательных приближений.

### § 3. Сохранение вероятности и оптическая теорема

В силу условия сохранения вероятности токи вероятности, уносимые обеими расходящимися волнами, должны в сумме равняться току, приносимому падающей волной. Поскольку все волны в рассматриваемом процессе упругого рассеяния имеют одно и то же волновое число и одну и ту же скорость, то указанные токи просто пропорциональны плотностям вероятности нахождения частицы в волне, причем множитель пропорциональности один и тот же. Сумма плотностей вероятности нахождения частицы в обеих расходящихся волнах должна равняться плотности вероятности нахождения частицы в падающей волне, т. е.

$$|R|^2 + |S|^2 = 1 \quad (8.14)$$

Обратите внимание на то, что формулы (8.11) удовлетворяют этому требованию.

Полная интенсивность рассеяния равна сумме интенсивностей волн, рассеянных вперед и назад (в трехмерном случае нужно было бы рассмотреть интеграл от интенсивности рассеяния по всем углам):

$$|g(0)|^2 + |g(\pi)|^2 = |R|^2 + |S - 1|^2 = 2\operatorname{Re}(1 - S) = -2\operatorname{Re}g(0); \quad (8.15)$$

здесь мы воспользовались условием (8.14).

Функция  $g(\theta)$  безразмерная, и квадрат ее дает вероятность рассеяния. В трехмерном случае амплитуда рассеяния всегда естественным образом определяется так, что имеет размерность длины, а ее квадрат определяет величину «поперечного сечения рассеяния». Дополнительный множитель размерности длины появляется в трехмерном случае по той причине, что решение для свободных частиц, соответствующее расходящейся волне, есть  $e^{ikr}/r$ , а не  $e^{ikr}$ . Трехмерный аналог формулы (8.13а) имеет вид

$$\psi^{(+)}(x) = e^{ikx} + f(\theta) e^{ikr}/r, \quad (8.16a)$$

где  $f(\theta)$  называется «амплитудой рассеяния»; она, как мы видим, действительно имеет размерность длины. Перепишем второе слагаемое в (8.16а) следующим образом:

$$f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = g(\theta) \frac{e^{ikr}}{ikr}; \quad (8.16b)$$

соотношение (8.16b) связывает  $f(\theta)$  с безразмерной амплитудой  $g(\theta)$ ; последняя является естественным обобщением нашей функции  $g(\theta)$ , появившейся у нас в одномерном случае. Таким образом, в одномерной теории мы определяем амплитуду рассеяния формулой

$$f(\theta) \equiv \frac{1}{ik} g(\theta). \quad (8.16b)$$

Подставляя (8.16в) в (8.15), сразу получаем

$$\sum_{\theta=0, \pi} |f(\theta)|^2 = -2k^{-2} \operatorname{Re} [ikf(0)] = 2k^{-1} \operatorname{Im} [f(0)]. \quad (8.17)$$

Это соотношение показывает, что полная интенсивность рассеяния пропорциональна мнимой части амплитуды рассеяния вперед; соотношение (8.17) называют «оптической теоремой». В трехмерном случае появляется числовой множитель 4л вместо 2. Нелинейное соотношение (8.17) имеет левую часть, квадратичную по амплитуде рассеяния, и правую — линейную по ней. Нелинейность возникла здесь только потому, что мы работали с определенной нормировкой волновой функции: нормировали коэффициент при падающей волне на единицу в правой части формулы (8.16а). Появление в правой части (8.17) мнимой части амплитуды никоим образом не указывает на физическую значимость абсолютной фазы волновой функции. Речь может идти, конечно, только о разности фаз, так как абсолютная фаза волновой функции уже фиксирована нашим условием нормировки, т. е. тем, что коэффициент при падающей волне мы взяли действительным.

Амплитуду рассеяния  $f(\theta)$  очень просто выразить через сдвиги фаз, если использовать формулы (8.11), (8.13) и (8.16в); в результате получаем

$$f(\theta) = k^{-1} \sum_{l=0, 1} e^{i\theta} e^{i\delta_l} \sin \delta_l. \quad (8.18)$$

Интуитивно ясно, как обобщить формулу (8.18) на трехмерный случай. В последнем амплитуда рассеяния  $f(\theta)$  будет функцией континуальной угловой переменной, описывающей рассеяние по любому направлению, а не только рассеяние «вперед» и «назад». Вместо симметрии потенциала относительно операции отражения выступает симметрия его относительно поворотов в пространстве, т. е. потенциал должен быть инвариантным по отношению к любому выбору направления в пространстве, а не только по отношению к выбору направления «назад» или «вперед». Сохраняющейся величиной, соответствующей поворотной инвариантности гамильтониана, будет момент количества движения. Вместо двух собственных состояний (8.9) оператора четности нужно будет рассмотреть бесконечное множество дискретных собственных состояний оператора момента количества движения, причем каждое из них будет иметь свой собственный сдвиг фазы. Разложение волновой функции рассеяния по собственным состояниям момента количества движения называется «разложением по парциальным волнам». В случае трех измерений амплитуда рассеяния (8.18) тоже выражается в виде суммы вкладов парциальных волн, при этом каждый вклад является некоторой функцией от соответствующего фазового сдвига.



§ 4. *S*-матрица

Волновую функцию (8.13) можно представить в виде суммы сходящейся и расходящейся волн, если записать первое слагаемое в ней в полярных координатах так же, как уже записано в этой формуле второе слагаемое. Тогда получим

$$\psi_0^{(+)} = \delta_{\theta\pi} e^{-ikr} + [g(\theta) + \delta_{\theta 0}] e^{ikr} \quad \text{при } r > X; \quad (8.19a)$$

здесь нижний индекс 0 при волновой функции указывает, что соответствующая падающая волна распространяется в направлении «вперед», т. е. слева направо. Поскольку наш потенциал инвариантен относительно отражения, то можно построить еще одно решение уравнения Шредингера, соответствующее решению (8.19a), если отразить эту волновую функцию в начале координат. В полярных координатах операция отражения соответствует замене  $\theta$  на  $\pi - \theta$ , так что мы имеем

$$\psi_{\pi}^{(+)} = \delta_{\theta 0} e^{-ikr} + [g(\pi - \theta) + \delta_{\theta\pi}] e^{ikr} \quad \text{при } r > X; \quad (8.19б)$$

здесь нижний индекс  $\pi$  при волновой функции указывает на то, что падающая волна распространяется в направлении «назад», т. е. справа налево. Обе функции (8.19a) и (8.19б) можно записать в виде одной формулы

$$\psi_{\theta}^{(+)} = \delta_{\theta, \pi - \theta} e^{-ikr} + [g(\theta' - \theta) + \delta_{\theta\theta'}] e^{ikr} \quad \text{при } r > X. \quad (8.19в)$$

Любая линейная комбинация функций (8.19a) и (8.19б) также будет некоторым решением нашего уравнения Шредингера. Поскольку любую функцию от двузначной переменной  $\theta$  можно выразить в виде линейной комбинации двух функций  $\delta_{\theta\pi}$  и  $\delta_{\theta 0}$ , то мы легко можем построить решения со сходящейся волной  $e^{-ikr}$ , умноженной на произвольную функцию от  $\theta$ . Пусть  $\phi_1(\theta)$  и  $\phi_2(\theta)$  — какие-то две ортонормированные функции  $\theta$  в двумерном векторном пространстве линейных комбинаций функций (со значениями  $\theta = 0$  и  $\theta = \pi$ ). С помощью их мы можем построить два соответствующих решения, комбинируя (8.19a) и (8.19б):

$$\psi_{\alpha}^{(+)} = \phi_{\alpha}(0) \psi_0^{(+)} + \phi_{\alpha}(\pi) \psi_{\pi}^{(+)} = \sum_{\theta'=0, \pi} \phi_{\alpha}(\theta') \psi_{\theta'}^{(+)}, \quad (8.20a)$$

$$\psi_{\alpha}^{(+)} = \phi_{\alpha}(\pi - \theta) e^{-ikr} + \sum_{\beta=1, 2} S_{\alpha\beta} \phi_{\beta}(\theta) e^{ikr} \quad \text{при } r > X, \quad (8.20б)$$

причем  $\alpha = 1, 2$ . Для матрицы  $S_{\alpha\beta}$  в (8.20б) мы имеем формулу

$$S_{\alpha\beta} = \sum_{\theta, \theta'} \phi_{\beta}^*(\theta) [g(\theta' - \theta) + \delta_{\theta\theta'}] \phi_{\alpha}(\theta'). \quad (8.20в)$$

Матрица  $S_{\alpha\beta}$  называется «*S*-матрицей»; величина  $S_{\alpha\beta}$  равна амплитуде расходящейся волны типа  $\beta$ , получаемой из сходящейся волны типа  $\alpha$ .

Согласно условию сохранения вероятности, требуется, чтобы полная интенсивность расходящихся волн была равна интенсивности сходящихся волн для любой линейной комбинации  $\sum_{\alpha} U_{\alpha} \psi_{\alpha}^{(+)}$  ( $\alpha = 1, 2$ ) из состояний (8.20б). Поскольку функции  $\phi_{\alpha}$  и  $\phi_{\beta}$  ортонормированы, то, приравнявая интенсивности сходящихся и расходящихся волн, получаем

$$\sum_{\alpha\beta\gamma} U_{\gamma}^* S_{\gamma\beta}^* U_{\alpha} S_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha} U_{\alpha}^* U_{\alpha}. \quad (8.21a)$$

Так как соотношение (8.21a) должно выполняться при любых значениях коэффициентов  $U_{\alpha}$ , то мы должны иметь

$$\sum_{\beta=1,2} S_{\alpha\beta} S_{\gamma\beta}^* = \delta_{\alpha\gamma}. \quad (8.21б)$$

Таким образом,  $S$ -матрица унитарна.

Когда потенциал отсутствует, расходящаяся и сходящаяся волны совпадают и, как это видно из формулы (8.20б),  $S$ -матрица равна единичной матрице.

Используя условие унитарности (8.21б), мы можем построить другую систему двух соответствующих решений, т. е.

$$\begin{aligned} \psi_{\gamma}^{(-)} &= \sum_{\alpha=1,2} \psi_{\alpha}^{(+)} S_{\alpha\gamma}^* = & 1201 \\ &= \sum_{\alpha=1,2} \phi_{\alpha}(\pi - \theta) S_{\alpha\gamma}^* e^{-ikr} + \phi_{\gamma}(\theta) e^{ikr} \quad \text{при } r > X; \end{aligned} \quad (8.22a)$$

здесь  $\alpha = 1, 2$ . В этих решениях имеются одна расходящаяся волна и сумма сходящихся волн. Они отличаются от рассмотренных выше решений, в которых имелись одна сходящаяся волна и сумма расходящихся волн. Заметим, что функции, обладающие такими свойствами, можно построить из решений (8.20б), заменяя  $\theta$  на  $\pi - \theta$  и выполняя комплексное сопряжение, т. е.

$$[\psi_{\alpha}^{(+)}(\pi - \theta)]^* = \phi_{\alpha}^*(\theta) e^{ikr} + \sum_{\beta=1,2} S_{\alpha\beta}^* \phi_{\beta}^*(\pi - \theta) e^{-ikr}. \quad (8.22б)$$

Подставляя функции (8.22б) в уравнение Шредингера, легко убедиться, что они являются решениями этого уравнения при условии, если потенциал действительный, т. е. если потенциал остается инвариантным при обращении времени. В таком случае решения (8.22а) и (8.22б) должны описывать одни и те же физические состояния, отличающиеся друг от друга только фазовыми множителями. Это в свою очередь приводит к условиям, которым должна удовлетворять  $S$ -матрица, чтобы быть инвариантной относительно обращения времени. Когда фазы выбраны так, что базисные состояния  $\phi_{\alpha}(\theta)$  действительны [например, ими являются состояния (8.19)], тогда требование инвариантности относительно обращения времени приводит к требованию симметрии  $S$ -матрицы.

Полученный результат согласуется с нашими интуитивными представлениями об отражении времени, поскольку при этом вероятность перехода из состояния  $\alpha$  в состояние  $\beta$  должна быть в точности такой же, как вероятность перехода из состояния  $\beta$  в состояние  $\alpha$ .

$S$ -матрицу можно легко диагонализировать в случае нашего потенциала, обладающего симметрией отражения: нужно только взять собственные состояния четности (8.9) в качестве базисных состояний. В полярных координатах эти состояния имеют вид

$$\psi_0 = \cos(kr + \delta_0) = \frac{1}{2} e^{-i\delta_0} [e^{-ikr} + e^{2i\delta_0} e^{ikr}], \quad \text{при } r > X, \quad (8.23a)$$

$$\psi_1 = e^{i\theta} \sin(kr + \delta_1) = \frac{1}{2} i e^{-i\delta_1} e^{i\theta} [e^{-ikr} - e^{2i\delta_1} e^{ikr}] \quad \text{при } r > X. \quad (8.23b)$$

Из состояний (8.23a) и (8.23b) можно построить другие состояния, отличающиеся другим выбором нормировки и фазовых множителей, т. е. состояния

$$\psi_l = e^{i\theta} [e^{-ikr} + (-1)^l e^{2i\delta_l} e^{ikr}]. \quad (8.23в)$$

Эти функции можно также записать в виде, напоминающем (8.20б), так как

$$\psi_l = - [e^{i(\pi-\theta)} e^{-ikr} + e^{2i\delta_l} e^{i\theta} e^{ikr}]. \quad (8.23г)$$

Сравнивая последнюю формулу с формулой (8.20б), мы видим, что

$$\phi_l(\theta) = e^{i\theta}, \quad (8.24a)$$

а также, что

$$S_{ll'} = e^{2i\delta_l} \delta_{ll'}. \quad (8.24б)$$

Зная  $S$ -матрицу, мы имеем полное описание процесса рассеяния.  $S$ -матрица позволяет найти рассеянные волны для всех падающих волн. В общем случае, когда наряду с процессом упругого рассеяния имеется процесс неупругого рассеяния,  $S$ -матрица связывает все возможные состояния, которые могут переходить друг в друга в процессе рассеяния; тогда индексы  $\alpha$  и  $\beta$  будут индексами всех возможных «каналов», а не просто индексами, относящимися к каналам рассеяния «вперед» и «назад». Исследователи некоторых школ в физике элементарных частиц считают  $S$ -матрицу самой основной фундаментальной величиной, поскольку именно элементы  $S$ -матрицы измеряются в экспериментах по рассеянию, а не сам гамильтониан или другие динамические переменные (например, поля).

### § 5. Передача заряда при рассеянии каонов на нуклонах и многоканальное рассеяние

Как пример процесса многоканального рассеяния можно взять процесс рассеяния частиц, обладающих дополнительной степенью свободы, например электрическим зарядом. Это позволяет, кроме процессов упругого рассеяния, рассмотреть также и процессы неупругого рассеяния, например рассеяние с передачей заряда. Рассмотрим в данном параграфе рассеяние каона на потенциале, создаваемом нуклоном, фиксированным в начале координат. Движением нуклона пренебрежем, но будем полагать, что он может быть либо протоном, либо нейтроном, т. е. что он может обмениваться зарядом с каоном, который может быть либо каоном  $K^+$ , либо  $K^0$ . Если начальное состояние будет каоном  $K^+$  и нейтроном, то может произойти «рассеяние с передачей заряда» в конечное состояние, которое состоит из каона  $K^0$  и протона. Разности масс  $n$  и  $p$ , а также  $K^0$  и  $K^+$  пренебрежимо малы, и поэтому можно считать, что передача заряда происходит без изменений энергии или импульса. Предположим, что потенциал инвариантен относительно отражения в начале координат и, кроме того, сохраняет изоспин.

Возьмем системы с электрическим зарядом  $Q = +1$ , т. е.  $K^+n$  и  $K^0p$ ; между ними возможен процесс передачи заряда. Мы не будем, таким образом, рассматривать системы  $K^+p$  и  $K^0n$ , поскольку для каждой из них, согласно закону сохранения заряда, возможен только упругий процесс рассеяния, т. е. для них рассеяние можно рассматривать в точности так же, как и выше [см. (8.6)]. Состояния с  $Q = +1$  при положительных энергиях принадлежат непрерывному спектру и являются *четырежды* вырожденными. Двукратное вырождение, которое имелось при отсутствии электрических зарядов, удваивается [см. (8.6)], потому что теперь есть два состояния  $K^+n$  и  $K^0p$  для каждой собственной функции гамильтониана (8.6). В областях  $x > X$  и  $x < -X$  собственные функции каон-нуклонного гамильтониана в точности такие же, как волновые функции свободных частиц, и мы можем взять любой базис из них, чтобы описать четыре вырожденных состояния. Нам неизвестен, конечно, вид соотношений между волновыми функциями в положительной и отрицательной областях оси  $x$ .

Чтобы описать эксперимент по рассеянию пучка  $K^+$  на протонной мишени, нам нужно иметь волновую функцию со следующими свойствами. В области  $x < -X$  она должна включать в себя падающую волну  $K^+n$  с импульсом  $+k$  и отраженные волны  $K^+n$  и  $K^0p$  с импульсами, равными  $-k$ . В области  $x > X$  волновая функция должна иметь прошедшие волны  $K^+n$  и  $K^0p$  с импульсом  $+k$  и не иметь никаких волн с импульсом  $-k$ . Другими словами, волновая функция должна иметь падающую на протонную

мишень волну  $K^+$ , приходящую из минус бесконечности  $x = -\infty$ , и расходящиеся волны в обоих направлениях, которые могут быть волнами  $K^+n$  или  $K^0p$ .

Нашу теорию из § 1—4 настоящей главы очень легко обобщить, чтобы иметь возможность описывать указанные многоканальные волновые функции. Для нумерации отдельных каналов мы введем дополнительный индекс  $q$ , который принимает значение  $+$  для состояния  $K^+n$  и значение  $0$  для состояния  $K^0p$ . Тогда вместо (8.13а) можно написать формулу

$$\Psi_q^{(+)} = U_q e^{ikx} + \sum_s g_{qs}(\theta) U_s e^{ikr} \quad \text{при } r > X, \quad (8.25a)$$

в которой  $U_q$  — заряд данного состояния, а  $g_{qs}(\theta)$  — матрица размерности  $2 \times 2$  в зарядовом пространстве. Подобным образом вместо формулы (8.20б) имеем

$$\Psi_{q\alpha}^{(+)} = U_q \phi_\alpha(\pi - \theta) e^{-ikr} + \sum_{\beta=1,2} S_{q\alpha, s\beta} U_s \phi_\beta(\theta) e^{ikr} \quad \text{при } r > X. \quad (8.25b)$$

$S$ -матрица теперь имеет дополнительные индексы зарядовых каналов и дается формулой, более общей, чем формула (8.20в):

$$S_{q\alpha, s\beta} = \sum_{\theta, \theta'} \phi_\beta^*(\theta) [g_{qs}(\theta' - \theta) + \delta_{\theta\theta'} \delta_{qs}] \phi_\alpha(\theta'). \quad (8.25в)$$

Поскольку изоспин сохраняется при взаимодействии, то удобно ввести в рассмотрение изоспиновые собственные функции

$$U^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (U_+ + U_0), \quad (8.26a)$$

$$U^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (U_+ - U_0). \quad (8.26б)$$

Мы можем тогда найти одновременные собственные функции изоспина и четности, обобщая формулу (8.23г):

$$\psi_i^{(T)} = -U^{(T)} [e^{i(\pi-\theta)} e^{-ikr} + e^{2i\delta_i^T} e^{i\theta} e^{ikr}]. \quad (8.27a)$$

Четыре собственные функции изоспина и четности нельзя связать друг с другом процессом рассеяния, и каждая из них характеризуется своим сдвигом фазы. Таким образом,  $S$ -матрица принимает вид

$$S_{Tl, T'l'} = e^{2i\delta_l^T} \delta_{TT'} \delta_{ll'}. \quad (8.27б)$$

Амплитуды рассеяния  $g_{qr}(\theta)$  легко можно выразить через входящие в формулы (8.27а) и (8.27б) сдвиги фаз.

В случае когда падает  $K^+$ , имеем  $q = +$ , и поэтому мы приходим к формулам

$$g_{++}(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{l, T} i e^{i l \theta} e^{i \delta_l^T} \sin \delta_l^T, \quad (8.28a)$$

$$g_{+0}(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{l, T} i e^{i l \theta} (-1)^{T-1} e^{i \delta_l^T} \sin \delta_l^T. \quad (8.28b)$$

Как видим, метод сдвигов фаз позволяет очень легко разделить зависимость изоспина и угла рассеяния, так как в нем с самого начала используются собственные состояния изоспина и четности. Вообще любая симметрия в задаче рассеяния позволяет разбить амплитуду рассеяния на слагаемые, которые не связаны рассеянием друг с другом, так как соответствуют различным значениям сохраняющейся (при рассеянии) величины. Таким образом, можно построить парциальные волны для каждого набора собственных значений и выразить амплитуду соответствующих парциальных волн через соответствующие сдвиги фаз.

В общей задаче рассеяния может быть очень много возможных каналов, а не только  $K^+n$  и  $K^0p$ , как в нашем простом примере. Например, при рассеянии протонов на ядрах  $^{12}\text{C}$  могут происходить реакции, в которых наблюдаются разлетающиеся нейтроны, дейтроны или  $\alpha$ -частицы; после вылета каждой из названных частиц остаются различные остаточные ядра, способные находиться либо в своем основном состоянии, либо в одном из возбужденных состояний. Можно было бы легко обобщить формулы (8.25) для волновых функций, чтобы иметь возможность применить их к случаю произвольного числа каналов. Пусть индекс  $q$  описывает вообще все «внутренние» степени свободы падающей и рассеянной частиц. В случае, подобном рассеянию протонов на  $^{12}\text{C}$ , функция  $U_q$  должна описывать не только рассеяние обеих частиц, но также и структуру конкретного состояния «остаточного ядра». Функция  $g_{qs}(\theta)$  будет тогда матрицей  $n \times n$ , где  $n$  — число каналов, и  $S$ -матрица будет более обширной. Когда нет никакой симметрии, которая позволила бы нам разбить проблему на не связанные друг с другом каналы, тогда метод сдвигов фаз не дает нам полного решения задачи и приходится решать многоканальное уравнение Шредингера каким-то другим способом. Именно так и обстоит дело в задаче рассеяния протонов на ядре  $^{12}\text{C}$ .

## § 6. Дельта-потенциал

Покажем теперь, как решать задачу рассеяния для короткодействующего потенциала, отличного от нуля только в области, размеры которой очень малы по сравнению с длиной волны рассеиваемой

мой частицы, т. е.

$$kX \ll 1. \quad (8.29)$$

Уравнение Шредингера

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right] \psi = E\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi \quad (8.30a)$$

перепишем в обычном виде

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \psi = \frac{2mV}{\hbar^2} \psi = U\psi, \quad (8.30b)$$

где

$$U(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V(x). \quad (8.30b)$$

Уравнение (8.30b) можно проинтегрировать по  $x$  на отрезке от  $-X$  до  $+X$ , вне которого потенциал обращается в нуль. В результате получим формулу

$$\frac{d\psi(+X)}{dx} - \frac{d\psi(-X)}{dx} + k^2 \int_{-X}^{+X} \psi dx = \int_{-X}^{+X} U\psi dx. \quad (8.31)$$

Для короткодействующего потенциала, удовлетворяющего условию (8.29), волновая функция не может очень сильно измениться в области, где потенциал отличен от нуля. Формула (8.31) как раз дает изменение произвольной волновой функции, взятой на одном и другом концах отрезка ненулевого значения потенциала. Как видим, правая часть (8.31) — это интеграл от произведения волновой функции и потенциала. Чтобы упростить вычисления, предположим, что потенциал имеет «нулевой размер», т. е. что

$$U(x) = -U_0 \delta(x). \quad (8.32)$$

Подставив (8.32) в (8.31), устремим теперь в (8.31)  $X \rightarrow 0$ . Тогда для решения с четной четностью (8.9a) получим

$$\frac{d\psi_0(0+)}{dx} - \frac{d\psi_0(0-)}{dx} = -2k \sin \delta_0 = -U_0 \psi_0(0) = U_0 \cos \delta_0. \quad (8.33)$$

Таким образом, сдвиг фазы для волны четной четности равен

$$\text{tg } \delta_0 = \frac{U_0}{2k} \quad (8.34a)$$

и соответствующий диагональный элемент  $S$ -матрицы можно записать в виде

$$e^{2i\delta_0} = \frac{1+i \text{tg } \delta_0}{1-i \text{tg } \delta_0} = \frac{1+i(U_0/2k)}{1-i(U_0/2k)} = \frac{2k+iU_0}{2k-iU_0}. \quad (8.34b)$$

Решение с нечетной четностью (8.34б) обращается в нуль в начале координат; поэтому его сдвиг фазы обращается в нуль для нашего потенциала нулевого размера, т. е.

$$\delta_1 = 0, \quad (8.35a)$$

$$e^{2i\delta_1} = 1. \quad (8.35б)$$

Подставляя (8.34) и (8.35) в (8.18), получаем для амплитуды рассеяния следующие формулы:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} [e^{2i\delta_0} - 1] = \frac{U_0}{k[2k - iU_0]}, \quad (8.36a)$$

$$g(\theta) = \frac{iU_0}{2k - iU_0}. \quad (8.36б)$$

Теперь мы построили полное решение задачи рассеяния. Интенсивность волн, рассеянных вперед и назад, непосредственно вычисляется по формулам (8.36).

Поскольку, согласно (8.36а), функция  $f(\theta)$  не зависит от  $\theta$ , то амплитуды рассеяния вперед и назад равны друг другу. Понятно почему так происходит. Волна четной четности рассеивается нашим потенциалом, а волна нечетной четности совсем не рассеивается им. Так как обе волны с четной и нечетной четностями имеют абсолютно одинаковые амплитуды рассеяния назад и вперед, но в одной волне они складываются, а в другой — вычитаются, то разница между амплитудами рассеяния вперед и назад может появиться лишь в том случае, когда в решении присутствуют обе волны. Это непосредственно видно из формул (8.23). (Аналогичные соображения можно привести и в трехмерном случае.) Любое различие между рассеянием вперед и назад получается лишь за счет интерференции волн с четной и нечетной четностями.

Формула (8.36б), будучи подставленной в (8.13а), дает решение дифференциального уравнения Шредингера (8.30а), справедливое при всех значениях  $k$ . Поучительно рассмотреть данное решение не только при действительных, но также и при комплексных  $k$ . Если  $k$  — комплексная величина, то мнимая часть  $k$  будет давать вклад в действительные части показателей экспонент в (8.13а). Как сходящаяся, так и расходящаяся волны будут с положительными действительными показателями экспонент, и это приведет к тому, что амплитуда волны будет безгранично возрастать на больших расстояниях при положительных или отрицательных  $x$ . Эти решения с комплексными  $k$ , конечно, не описывают физических состояний, и их надо отбросить, так как они не удовлетворяют граничным условиям, налагаемым на решения уравнения Шредингера. Однако интересно отметить, что амплитуда рассеяния (8.36) и диагональный элемент матрицы рассеяния (8.34б) имеют полюс при  $k = (i/2) U_0$ . Таким образом, при комплексном  $k$ , стремящемся



к этому значению, амплитуда рассеянной волны в (8.13а) безгранично возрастает. Если нормировать рассматриваемое решение с комплексным  $k$  так, чтобы все время удерживать амплитуду рассеянной волны постоянной, то первое слагаемое в (8.13а) при стремлении  $k$  к  $k = (i/2) U_0$  будет стремиться к нулю и обратится в нуль в полюсе. При  $k = (i/2) U_0$  формула (8.13а) дает решение, в котором есть только расходящаяся волна и нет сходящейся волны. При положительных  $U_0$  величина  $K = (i/2) U_0$  чисто мнимая и положительная, показатель экспоненты получается действительным и отрицательным и амплитуда решения обращается в нуль на больших расстояниях, т. е. она удовлетворяет правильному граничному условию. Таким образом, мнимое значение  $k = (i/2) U_0$  дает физически допустимое решение уравнения Шредингера. Так как амплитуда данного решения стремится к нулю на больших расстояниях, то указанное решение соответствует связанному состоянию. Волновая функция его имеет вид

$$\psi_B(x) = e^{-\frac{1}{2} U_0 x}. \quad (8.37a)$$

Как легко убедиться непосредственно, волновая функция связанного состояния (8.37а) удовлетворяет уравнению Шредингера

$$H\psi_B(x) = E\psi_B(x) = -\hbar^2 \frac{U_0^2}{8m} \psi_B(x). \quad (8.37b)$$

Волновая функция (8.37а) обладает очень интересной особенностью: вся она сосредоточена вне области действия потенциала. Измеряя положение частицы в состоянии, описываемом этой функцией, мы всегда будем находить частицу в точке, в которой на нее не действует никаких сил, а вместе с тем частица является связанной. Такая особенность, несомненно, отражает здесь нефизические свойства дельта-потенциала, но она характерна и для потенциалов, имеющих конечные размеры, так как непосредственно связана с дуализмом «волна — частица» в квантовой механике. Если область, занятая потенциалом, мала по сравнению с длиной волны частицы, то волну никак нельзя загнать в область действия потенциала. Она обязательно вылезет наружу. Кроме того, могут существовать решения, имеющие вид стоячих волн, но с хвостом, простирающимся далеко за пределы области действия потенциала. Таким образом, может быть очень большая вероятность найти частицу в области, где на нее не действует никаких сил. Связывание отражает волновую природу частицы; эта волновая природа заставляет частицу размазываться по конечной области, практически в области действия потенциала.

### § 7. Аналитические свойства амплитуды рассеяния

Изучая амплитуду рассеяния и  $S$ -матрицу как аналитические функции, заданные на комплексной плоскости  $k$ , мы можем получить много интересной физической информации о процессе рассеяния. Так, наличие полюса у этих функций свидетельствует о существовании связанного состояния у рассматриваемой квантовой системы, причем положение полюса на комплексной плоскости дает величину энергии данного связанного состояния.

Последнее правило является совершенно общим и его можно прилагать к любой задаче рассеяния, а не только к задаче с дельта-потенциалом. Если есть полюс, то обязательно существует решение уравнения Шредингера, имеющее вид второго слагаемого в (8.13а), т. е. вид приведенной там функции  $\psi^+(x)$  с отброшенной плоской волной. Если такое решение существует у невременного уравнения Шредингера, то из него можно получить решение временного уравнения Шредингера, умножая его на  $e^{-iEt/\hbar}$ , т. е. строя функцию

$$\psi(t) = g(\theta) e^{ikr} e^{-iEt/\hbar} \quad \text{при } r > X, \quad (8.38a)$$

причем здесь энергия  $E$  — комплексное число, определяемое формулой

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m. \quad (8.38b)$$

Если полюс, о котором идет речь, лежит на мнимой оси значений  $k$ , как, например, в (8.36), то энергия  $E$  получается действительной и отрицательной, и решение (8.38а) дает обычное связанное состояние. Если же полюс лежит в верхней полуплоскости  $k$ , когда  $k$  обладает положительной мнимой частью, то все равно мы будем иметь решение временного уравнения Шредингера, даваемое формулой (8.38а), с волновой функцией, которая будет экспоненциально убывать и стремиться к нулю на больших расстояниях. Пусть

$$k = k_1 + ik_2, \quad (8.39a)$$

тогда

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} [k_1^2 - k_2^2 + 2ik_1 k_2], \quad (8.39b)$$

и, следовательно,

$$\psi(t) = g(\theta) e^{ikr} e^{-i[k_1^2 - k_2^2]t/m} e^{-\hbar k_2 r} e^{\hbar k_1 k_2 t/m}. \quad (8.39b)$$

Как видно из формулы (8.39b), функция  $\psi(t)$  удовлетворяет всем нужным граничным условиям, налагаемым на шредингеровскую волновую функцию, в любой данный фиксированный момент времени  $t = t_0$ . (Эта функция экспоненциально стремится к нулю при больших расстояниях, так что она действительно описывает

некоторое состояние нашей физической системы в момент времени  $t = t_0$ .) Поскольку в уравнение Шредингера входит только первая производная по времени, его решение полностью задано в любой момент времени, если оно известно в момент времени  $t = t_0$ . Так как функция  $\psi(t)$ , даваемая (8.39в), есть решение уравнения Шредингера, то она является единственным решением, соответствующим данным начальным условиям. Однако при  $k_1 > 0$  функция (8.39в) экспоненциально *возрастает* со временем, т. е. амплитуда рассеяния в каждый заданный канал безгранично увеличивается. Это противоречит закону сохранения вероятности, и, следовательно, никаких физических решений временного уравнения с  $k_1 > 0$  не может существовать. Таким образом,  $S$ -матрица, рассматриваемая как аналитическая функция энергии  $E$ , не может иметь на комплексной плоскости полюсов в верхней полуплоскости, т. е. с положительной мнимой частью. Полюс в нижней полуплоскости  $E$ , т. е. при  $k_1 < 0$ , вполне возможен, поскольку он соответствует экспоненциально убывающей вероятности в каждом данном канале рассеяния. Это означает, что вероятность должна возрасть в некотором другом канале, чтобы полная вероятность сохранялась. Однако неограниченное экспоненциальное возрастание вероятности со временем в каком-то одном из каналов не может быть компенсировано убыванием вероятности в других каналах и поэтому недопустимо.

Любая амплитуда рассеяния или  $S$ -матрица, полученные из решения уравнения Шредингера, почти автоматически имеют эти аналитические свойства, так как требование сохранения вероятности автоматически включено в уравнение Шредингера. Указанные аналитические свойства можно предполагать, однако, и в тех случаях, когда мы не знаем уравнения Шредингера или же когда мы его знаем, но не можем решить. Если относительно некоторой функции известно, что она аналитична в определенной области комплексной плоскости, то мы можем использовать теорему Коши для вычисления интегралов от этой функции. Обычно непосредственно физически интересные значения функции лежат на действительной оси, и мы должны рассматривать интеграл по контуру, состоящему из действительной оси от  $-\infty$  до  $+\infty$  и полуокружности в верхней полуплоскости. Таким образом, получаются соотношения, связывающие интегралы от амплитуды рассеяния (или от какой-то функции от амплитуды рассеяния), берущиеся вдоль действительной оси, и характеристики предполагаемого асимптотического поведения рассеяния при бесконечной энергии (которые связаны с вкладом в контурный интеграл от большой полуокружности). Такого рода соотношения называются «дисперсионными соотношениями»; они крайне важны в физике элементарных частиц.

### § 8. Двойной дельта-потенциал

Одинарный дельта-потенциал обладает одним серьезным недостатком: он не имеет размера и этим существенно отличается от любого физического потенциала. Физические потенциалы действуют в областях конечных размеров, и для них возможны также и такие процессы рассеяния, когда длина волны падающих частиц оказывается меньше по сравнению с размерами области действия потенциала. Кроме того, могут быть также и резонансы, когда целое число полуволн точно покрывает линейный размер области действия потенциала и когда, следовательно, могут возникнуть стоячие волны. Всех этих явлений не может быть в принципе для дельта-потенциала, имеющего нулевой размер.

Простой дельта-потенциал легко модифицировать так, чтобы он стал обладать конечным размером; просто надо взять потенциал из двух  $\delta$ -функций, разделенных некоторым конечным расстоянием. Чтобы сохранить симметрию относительно отражения, мы поместим обе  $\delta$ -функции в точки  $+1/2a$  и  $-1/2a$ , т. е. положим

$$U(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = -\frac{1}{2} U_0 \left[ \delta \left( x - \frac{1}{2} a \right) + \delta \left( x + \frac{1}{2} a \right) \right]. \quad (8.40)$$

Чтобы полная «сила» двойного дельта-потенциала была такой же, как и одинарного дельта-потенциала, необходимо считать, что сила каждого отдельного дельта-потенциала равна  $1/2 U_0$ . Потенциал (8.40) переходит в одинарный дельта-потенциал (8.32) при  $a = 0$ .

Чтобы решить уравнение Шредингера, мы проинтегрируем его по  $x$  от  $1/2a - \epsilon$  до  $1/2a + \epsilon$ , где  $\epsilon$  — очень малая величина. Тогда получим

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} \left( \frac{1}{2} a + \epsilon \right) - \frac{d\psi}{dx} \left( \frac{1}{2} a - \epsilon \right) + k^2 \int_{\frac{1}{2} a - \epsilon}^{\frac{1}{2} a + \epsilon} \psi dx = \\ = \int_{\frac{1}{2} a - \epsilon}^{\frac{1}{2} a + \epsilon} U \psi dx = -\frac{1}{2} U_0 \psi \left( \frac{1}{2} a \right). \end{aligned} \quad (8.41a)$$

Разделив на  $\psi(1/2a)$  и отбросив интеграл в левой части, который мал и имеет порядок  $\epsilon$ , получим далее

$$\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \left( \frac{1}{2} a + \epsilon \right) - \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \left( \frac{1}{2} a - \epsilon \right) = -\frac{1}{2} U_0. \quad (8.41b)$$

Поскольку сама функция  $\psi$  непрерывна при  $1/2a$ , то ее значения при  $1/2a \pm \epsilon$  равны друг другу. Формула (8.41b) очень полезна,

так как входящая в нее логарифмическая производная не зависит от нормировки волновой функции.

Используем теперь условие (8.41б), чтобы «сшить» решения, имеющиеся с двух сторон от области действия дельта-потенциала. Точные решения уравнения Шредингера для интервала  $-1/2 a \leq x \leq +1/2 a$  с четной и нечетной четностями — это просто соответствующие решения для свободной частицы:

$$\psi_0(x) = \cos kx, \quad \frac{1}{\psi_0} \frac{d\psi_0}{dx} = -k \operatorname{tg} kx, \quad -\frac{1}{2} a \leq x \leq \frac{1}{2} a, \quad (8.42a)$$

$$\psi_1(x) = \sin kx, \quad \frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dx} = +k \operatorname{ctg} kx, \quad -\frac{1}{2} a \leq x \leq \frac{1}{2} a. \quad (8.42б)$$

Вне области действия потенциала собственные функции четности выражаются обычными формулами, в которые входят сдвиги фаз, т. е.

$$\psi_0(x) = \cos(kx \pm \delta_0), \quad \frac{1}{\psi_0} \frac{d\psi_0}{dx} = -k \operatorname{tg}(kx \pm \delta_0), \quad \pm x > \frac{1}{2} a, \quad (8.43a)$$

$$\psi_1(x) = \sin(kx \pm \delta_1), \quad \frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dx} = +k \operatorname{ctg}(kx \pm \delta_1), \quad \pm x > \frac{1}{2} a. \quad (8.43б)$$

Величины самих сдвигов фаз можно определить из «условий сшивания» обоих решений (8.42) и (8.43) в точке  $x = 1/2 a$ , т. е. используя формулу (8.41б), которая дает нам соотношения

$$-k \operatorname{tg} \left( \frac{1}{2} ka + \delta_0 \right) + k \operatorname{tg} \left( \frac{1}{2} ka \right) = -\frac{1}{2} U_0, \quad (8.44a)$$

$$k \operatorname{ctg} \left( \frac{1}{2} ka + \delta_1 \right) - k \operatorname{ctg} \left( \frac{1}{2} ka \right) = -\frac{1}{2} U_0. \quad (8.44б)$$

Разрешая уравнения (8.44) относительно  $\delta_0$  и  $\delta_1$ , получаем

$$\operatorname{ctg} \delta_0 = \operatorname{tg} \frac{1}{2} ka + \frac{2k}{U_0} \sec^2 \frac{1}{2} ka = \frac{4k/U_0 + \sin ka}{1 + \cos ka}, \quad (8.45a)$$

$$\operatorname{ctg} \delta_1 = -\operatorname{ctg} \frac{1}{2} ka + \frac{2k}{U_0} \operatorname{cosec}^2 \frac{1}{2} ka = \frac{4k/U_0 - \sin ka}{1 - \cos ka}. \quad (8.45б)$$

Из формулы (8.45) следует:

1. При  $ka = 2n\pi$  значения сдвигов фаз (8.45) сводятся к значениям (8.34) и (8.35) для одинарного дельта-потенциала. При этом сюда включается и случай  $a = 0$ , когда оба потенциала становятся эквивалентными, а также и все те случаи, когда укладывается целое число длин волн между обоими дельта-потенциалами.

2. Сдвиг фазы  $\delta_0 = 0$  при  $ka = (2n + 1)\pi$  и сдвиг фазы  $\delta_1 = 0$  при  $ka = 2n\pi$ , поскольку знаменатели в формулах (8.45a) и (8.45б) обращаются в нуль в этих точках. В этом нетрудно убедиться, рассматривая непосредственно соотношение (8.41a). Когда  $\psi(1/2 a) = 0$ ,

правая часть (8.41а) обращается в нуль и никакого разрыва производной волновой функции в точке  $1/2a$  не может быть, а потому оба решения должны быть идентичны соответствующим решениям в случае свободной частицы, т. е. при отсутствии потенциала; иначе говоря, не должно быть никаких сдвигов фаз. Так получается для решения с четной четностью всякий раз, когда нечетное число полуволен точно укладывается на интервале между  $\pm 1/2a$ , и для решения с нечетной четностью, когда укладывается четное число полуволен на этом интервале. Таким образом, сдвиги фаз для решений с четной и нечетной четностями осциллируют в функции от  $k$  и периодически обращаются в нуль.

3. Для очень малых значений  $k$  формулы (8.45) принимают следующий вид:

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{U_0}{2k \left[ 1 + \frac{1}{2} aU_0 \right]} \quad \text{при } k \rightarrow 0, \quad (8.46a)$$

$$\operatorname{tg} \delta_1 = \frac{kU_0 a^2}{8 \left[ 1 - \frac{1}{2} aU_0 \right]} \quad \text{при } k \rightarrow 0. \quad (8.46b)$$

Сдвиг фазы для решения с нечетной четностью стремится к нулю, а для решения с четной четностью превращается в сдвиг фазы для одинарного дельта-потенциала (8.34а).

4. При очень больших значениях  $k$  формулы (8.45) переходят в формулы

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{U_0}{4k} (1 + \cos ka) \quad \text{при } k \rightarrow \infty, \quad (8.47a)$$

$$\operatorname{tg} \delta_1 = \frac{U_0}{4k} (1 - \cos ka) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (8.47b)$$

Тангенсы обоих сдвигов фаз осциллируют между нулем и значением  $U_0/2k$ , полученным ранее для одинарного дельта-потенциала.

Наиболее интересная область значений  $k$  — промежуточная область, в которой числители формул (8.45а) и (8.45б) могут обращаться в нуль. Для амплитуды рассеяния мы имеем совершенно точную формулу

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0, 1} e^{i l \theta} e^{i k l} \sin \delta_l = \frac{1}{k} \sum_{l=0, 1} \frac{e^{i l \theta}}{\operatorname{ctg} \delta_l - i}. \quad (8.48)$$

Согласно формуле (8.48), амплитуда рассеяния имеет максимум, или «резонанс», всякий раз, когда  $\operatorname{ctg} \delta_0 = 0$  или  $\operatorname{ctg} \delta_1 = 0$ . Из формул (8.45) мы видим, что

$$\operatorname{ctg} \delta_0 = 0 \quad \text{при} \quad \sin ka = -4k/U_0, \quad (8.49a)$$

$$\operatorname{ctg} \delta_1 = 0 \quad \text{при} \quad \sin ka = 4k/U_0. \quad (8.49b)$$

Когда  $U_0 a \gg 1$ , трансцендентные уравнения (8.49) имеют много решений, и мы получаем большое число резонансов. В окрестности каждого данного резонанса, т. е. в окрестности точки  $\delta_l = 0$ , мы можем разложить  $\text{ctg } \delta_l$  по степеням энергии и сохранить в разложении только линейный член. В результате получим формулу

$$\text{ctg } \delta_l = \frac{2}{\Gamma} (E - E_0), \quad (8.50a)$$

где  $E_0$  — значение энергии, при которой  $\text{ctg } \delta_l = 0$ , а  $\Gamma$  определяется из соотношения

$$\frac{2}{\Gamma} = \left[ \frac{d}{dE} (\text{ctg } \delta_l) \right]_{E=E_0}. \quad (8.50b)$$

В окрестности энергии  $E_0$  формулу (8.48) для амплитуды рассеяния можно записать в виде

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k} \frac{\frac{1}{2} e^{i\theta\Gamma}}{(E - E_0) + \frac{1}{2} i\Gamma}, \quad (8.51)$$

где  $f_l(\theta)$  — вклад в амплитуду рассеяния от парциальной волны, дающей резонанс. Формула (8.51) приводит к типичной форме резонансной кривой, для которой  $\Gamma$  — полуширина резонанса.

Точная амплитуда рассеяния (8.48) имеет полюсы при  $\text{ctg } \delta_l = i$ . Из формул (8.45) получаем

$$\text{ctg } \delta_0 - i = \frac{(4k/U_0 + \sin ka) - i(1 + \cos ka)}{1 + \cos ka} = -i \frac{[1 + e^{ika} + 4ik/U_0]}{1 + \cos ka}, \quad (8.52a)$$

$$\text{ctg } \delta_1 - i = \frac{(4k/U_0 - \sin ka) - i(1 - \cos ka)}{1 - \cos ka} = -i \frac{[1 - e^{ika} + 4ik/U_0]}{1 - \cos ka}. \quad (8.52b)$$

Отсюда видно, что полюсы в амплитуде рассеяния могут быть только при чисто мнимых значениях  $k$ , и поэтому если положить  $ik = -\lambda$ , где  $\lambda$  — действительная величина, то будем иметь следующие уравнения:

$$(1 + e^{-\lambda a}) - \frac{4\lambda}{U_0} = 0 \quad \text{для } \delta_0, \quad (8.53a)$$

$$(1 - e^{-\lambda a}) - \frac{4\lambda}{U_0} = 0 \quad \text{для } \delta_1. \quad (8.53b)$$

Из уравнения (8.53a) видно, что всегда есть одно связанное состояние в случае четной четности. В этом нетрудно убедиться из рассмотрения графика, на котором представлены функции  $1 + e^{-\lambda a}$  и  $4\lambda/U_0$  в зависимости от  $\lambda$ . Кривые, отвечающие этим функциям,

обязательно пересекаются в одной точке. Из уравнения (8.53б) можно усмотреть, что при больших значениях  $U_0$  будет единственное связанное состояние в случае нечетной четности, а при малых значениях  $U_0$  не будет ни одного связанного состояния. В этом тоже можно убедиться, рассматривая график, на котором функции  $1 - e^{-\lambda a}$  и  $4\lambda/U_0$  представлены в зависимости от  $\lambda$ . Критическое значение  $U_0$  определяется из условия, чтобы обе эти функции имели одинаковый наклон при  $\lambda = 0$ , т. е. из условия

$$U_0 = \frac{4}{a}. \quad (8.54)$$

При значениях  $U$ , больших значения  $U_0$ , определяемого (8.54), будет одно связанное состояние. Это заключение легко также проверить, решая непосредственно задачу о связанных состояниях для нашего уравнения Шредингера.

### § 9. Дельта-потенциал с возбужденным состоянием

Путем простого изменения одинарного дельта-потенциала можно получить также еще одну поучительную задачу рассеяния для системы с одним возбужденным состоянием, которое может возбуждаться в процессе рассеяния. Это модельная задача для соответствующих физических задач рассеяния каких-либо частиц на атомах, ядрах или молекулах, когда возможно неупругое рассеяние с возбуждением рассеивателя. Ниже в данном параграфе будем считать, что рассеиватель очень тяжелый и неподвижно зафиксирован в начале координат. Предположим, что он имеет только два состояния: основное и возбужденное. Тогда надо будет рассмотреть простую двузначную степень свободы рассеивателя, которая характеризует, находится ли он в основном или возбужденном состоянии. Волновая функция, описывающая такую систему, должна, таким образом, зависеть от координаты  $x$  частицы, которая рассеивается на рассеивателе, и от внутренней степени свободы рассеивателя. Наиболее общую функцию можно представить в виде линейной комбинации двух слагаемых, для одного из которых рассеиватель находится в основном состоянии, а для другого — в возбужденном состоянии, т. е.

$$|\psi\rangle = a_g^\dagger |0\rangle \psi_g(x) + a_e^\dagger |0\rangle \psi_e(x), \quad (8.55)$$

где  $a_g^\dagger$  и  $a_e^\dagger$  — операторы, рождающие рассеиватель в основном и возбужденном состояниях соответственно.

Гамильтониан рассматриваемой системы должен включать в себя кинетическую энергию частицы и энергии возбужденного и основного состояний рассеивателя. В качестве взаимодействия



мы возьмем дельта-потенциал, содержащий два слагаемых (слагаемое для упругого рассеяния, которое не изменяет состояния рассеивателя, и слагаемое для неупругого рассеяния, которое вызывает переходы из основного состояния в возбужденное). Таким образом, возьмем в качестве исходного следующий гамильтониан:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \delta(x) [U_0 (a_g^\dagger a_g + a_e^\dagger a_e) + U_1 (a_g^\dagger a_e + a_e^\dagger a_g)] + E_e a_e^\dagger a_e + E_g a_g^\dagger a_g. \quad (8.56)$$

Уравнение Шредингера для нашей системы легко разрешить, используя обычный стандартный метод рассмотрения дельта-потенциала. При всех значениях  $x$ , кроме начала координат, решение должно совпадать с решением для свободной частицы, никак не взаимодействующей с рассеивателем. Производная этого решения терпит разрыв в начале координат, причем величина скачка определяется силой потенциала, в чем можно убедиться, проинтегрировав уравнение Шредингера по  $x$  от  $x = -\varepsilon$  до  $x = +\varepsilon$ . В пределе  $\varepsilon \rightarrow 0$  единственными слагаемыми, которые дают вклады, будут слагаемое с разрывом производной и слагаемое с интегралом от потенциала дельта-функции. Для нашего гамильтониана (8.56) мы имеем соотношение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} - \frac{\hbar^2}{2m} [U_0 (a_g^\dagger a_g + a_e^\dagger a_e) + U_1 (a_g^\dagger a_e + a_e^\dagger a_g)] \psi(0) = 0. \quad (8.57)$$

Подставляя в соотношение (8.57) волновую функцию (8.55), мы получаем

$$a_g^\dagger |0\rangle \frac{d\psi_g}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + a_e^\dagger |0\rangle \frac{d\psi_e}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + [U_0 \psi_g(0) + U_1 \psi_e(0)] a_g^\dagger |0\rangle + [U_0 \psi_e(0) + U_1 \psi_g(0)] a_e^\dagger |0\rangle = 0. \quad (8.58)$$

Поскольку основное и возбужденное состояния рассеивателя ортогональны друг другу, то слагаемые для обоих состояний должны обращаться в нуль по отдельности, т. е.

$$\frac{d\psi_g}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + U_0 \psi_g(0) + U_1 \psi_e(0) = 0, \quad (8.59a)$$

$$\frac{d\psi_e}{dx} \Big|_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + U_0 \psi_e(0) + U_1 \psi_g(0) = 0. \quad (8.59b)$$

Знать формулы (8.59) вполне достаточно для нахождения точных решений (конечно, при условии, если мы будем использовать граничные условия). Рассмотрим задачу рассеяния с рассеивателем, находящимся в начале координат в основном состоянии. Поскольку наше взаимодействие сохраняет четность и поскольку

на решение с нечетной четностью дельта-потенциал в начале координат не может оказывать никакого влияния, то мы сразу рассмотрим только решение с четной четностью. Оно должно иметь обычный вид (с некоторым сдвигом фазы) для функции  $\psi_g(x)$ . Для функции  $\psi_e(x)$  нужно взять решение, которое имеет только расходящуюся волну и не имеет сходящейся волны. Таким образом, положим

$$\psi_g(x) = \alpha \cos(k|x| + \delta_0), \quad (8.60a)$$

$$\psi_e(x) = \beta e^{4k_e|x|}, \quad (8.60б)$$

где  $\alpha, \beta$  — коэффициенты, подлежащие определению, и где

$$k^2 = \frac{2m(E - E_g)}{\hbar^2}, \quad (8.60в)$$

$$k_e^2 = \frac{2m(E - E_e)}{\hbar^2} = k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} |E_e - E_g|. \quad (8.60г)$$

Подставляя (8.60) в (8.59), получаем

$$-2k\alpha \sin \delta_0 + U_0\alpha \cos \delta_0 + U_1\beta = 0, \quad (8.61a)$$

$$2ik_e\beta + U_0\beta + U_1\alpha \cos \delta_0 = 0. \quad (8.61б)$$

Разрешая эти уравнения относительно  $\beta/\alpha$ , приходим к формуле

$$\frac{\beta}{\alpha} = -\frac{U_1 \cos \delta_0}{U_0 + 2ik_e} = \frac{2k \sin \delta_0 - U_0 \cos \delta_0}{U_1}. \quad (8.62a)$$

Разрешая, наконец, уравнение (8.62a) относительно сдвига фазы  $\delta_0$ , будем иметь

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{U_0}{2k} - \frac{U_1^2}{2k(U_0 + 2ik_e)} = \frac{U_0}{2k} \left[ 1 - \frac{U_1^2}{U_0^2 + 4k_e^2} \right] + \frac{ik_e U_1^2}{k[U_0^2 + 4k_e^2]}. \quad (8.62б)$$

Как видно из (8.62б), сдвиг фазы может быть комплексным. Физический смысл комплексного сдвига фазы легко усмотреть из формул (8.11) для коэффициента отражения  $R$  и коэффициента прохождения  $S$  (выраженных через сдвиги фаз). При комплексных сдвигах фаз полная интенсивность отраженной и прошедшей волн дается формулой

$$\begin{aligned} |R|^2 + |S|^2 &= \frac{1}{2} [e^{2i(\delta_0 - \delta_0^*)} + e^{2i(\delta_1 - \delta_1^*)}] = \\ &= \frac{1}{2} [e^{-4 \operatorname{Im} \delta_0} + e^{-4 \operatorname{Im} \delta_1}] \leq 1, \quad (8.63) \end{aligned}$$

так что, когда сдвиги фаз имеют отличные от нуля мнимые части, полная интенсивность расходящейся волны оказывается *меньше*, чем интенсивность сходящейся волны. Это разумно, так как у нас имеется неупругое рассеяние. Действительно, в случае неупруго-

гого рассеяния рассеянная волна не обязательно должна иметь интенсивность, равную интенсивности падающей волны.

Выражение (8.62б) дает все, что нужно для описания неупругого рассеяния. Когда энергия падающей частицы слишком мала, чтобы возбудить возбужденное состояние, волновое число  $k_e$ , определяемое формулой (8.60г), оказывается мнимым, а сдвиг фазы, даваемый формулой (8.62б), — действительным, а следовательно, не будет никакой потери интенсивности рассеиваемого пучка. Когда энергия падающей частицы большая и достаточная для возбуждения рассеивателя, волновое число  $k_e$  будет действительным. В формуле (8.60б) его надо взять положительным, чтобы действительно описать расходящуюся волну. Следовательно, мнимая часть сдвига фазы, определяемого формулой (8.62б), в этом случае положительна, так что интенсивность упругого рассеяния, определяемая (8.63), будет меньше единицы.

Рассмотрим теперь полюсы амплитуды рассеяния. Они появляются всякий раз, когда

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{U_0}{2k} - \frac{U_1^2}{2k(U_0 + 2ik_e)} = -i. \quad (8.64)$$

Это уравнение можно также представить в следующем виде:

$$(U_0 + 2ik)(U_0 + 2ik_e) = U_1^2. \quad (8.65)$$

В пределе  $U_1 = 0$ , т. е. когда неупругого рассеяния нет, оба решения уравнения (8.65) имеют чисто мнимые значения  $k$  и  $k_e$ , т. е.

$$ik = -\lambda, \quad (8.66a)$$

$$ik_e = -\lambda_e, \quad (8.66b)$$

где  $\lambda$ ,  $\lambda_e$  — действительные величины. Значения  $\lambda$  и  $\lambda_e$  в случае  $U_1 = 0$  как раз дают положения полюсов, которые следовало бы ожидать для дельта-потенциала. Они соответствуют связанным состояниям нашей рассеивающейся частицы с рассеивателем, находящимся либо в основном, либо в возбужденном состоянии.

В случае когда  $U_1$  — малая, но конечная величина, удобно представить уравнение (8.65) в виде

$$\lambda = \frac{U_0}{2} - \frac{U_1^2}{2(U_0 - 2\lambda_e)}, \quad (8.67a)$$

$$\lambda_e = \frac{U_0}{2} - \frac{U^2}{2(U_0 - 2\lambda)} = \frac{U_0}{2} - \frac{U_1^2 U_0}{2(U_0^2 - 4\lambda^2)} - \frac{U_1^2 \lambda}{U_0^2 - 4\lambda^2}, \quad (8.67b)$$

причем  $\lambda$  и  $\lambda_e$  связаны соотношением

$$\lambda^2 = \lambda_e^2 - \frac{2m}{\hbar^2} (E_e - E_g). \quad (8.67b)$$

Отметим теперь следующее интересное обстоятельство. Когда «энергия связывания»  $1/2 U_0$  больше энергии возбуждения  $E_e - E_g$  рассеивателя, тогда оба рассматриваемых связанных состояния стабильны. Однако, когда энергия связывания оказывается меньше энергии возбуждения возбужденного состояния рассеивателя, тогда связанное состояние частицы с рассеивателем в возбужденном состоянии будет нестабильным и может распадаться на состояние, в котором рассеиватель находится в основном состоянии и имеется свободная частица. Все это легко видеть из формул (8.67б) и (8.67в). Когда выбранное значение  $\lambda_e$  соответствует связанному состоянию частицы с рассеивателем, находящимся в возбужденном состоянии, тогда из формулы (8.67в) видно, что  $\lambda$  будет действительной величиной, если энергия связывания станет больше энергии возбуждения, и  $\lambda$  будет чисто мнимой величиной, если энергия связывания станет меньше энергии возбуждения. Когда  $\lambda$  — действительная величина, тогда величина  $\lambda_e$ , определяемая формулой (8.67б), тоже действительная и соответствует связанному состоянию. Когда, однако,  $\lambda$  — мнимая величина, тогда величина  $\lambda_e$ , даваемая формулой (8.67б), имеет отличную от нуля мнимую часть и соответствует распадному состоянию, или резонансу. В этом случае мы должны подставить (8.66) снова в (8.67б), что даст

$$\lambda_e = \frac{U_0}{2} - \frac{U_1^2 U_0}{2(U_0^2 + 4k^2)} + i \frac{U_1^2 k}{U_0^2 + 4k^2}. \quad (8.68a)$$

Следовательно, резонансная энергия определяется формулой

$$E_{\text{рез}} = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda_e^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{U_0}{2} - \frac{U_1^2 U_0}{2(U_0^2 + 4k^2)} \right)^2 - \frac{U_1^4 k^2}{(U_0^2 + 4k^2)^2} \right] + \frac{1}{2} i\Gamma, \quad (8.68б)$$

в которой

$$\Gamma = \frac{\hbar^2 k U_0 U_1^2}{2m(U_0^2 + 4k^2)} \left[ 1 - \frac{U_1^2}{U_0^2 + 4k^2} \right]. \quad (8.68в)$$

Распад резонансного состояния можно рассмотреть также и с помощью временной теории возмущений. Невозмущенные волновые функции возьмем для системы, для которой  $U_1 = 0$ , т. е.  $U_0$  включим в невозмущенный гамильтониан, чтобы иметь возможность описать связанные состояния. При отсутствии  $U_1$  оба связанных состояния устойчивы. В первом порядке временной теории возмущений скорость распада возбужденного связанного состояния дается формулой «золотого правила», и для полуширины распадающегося состояния мы получаем формулу

$$\Gamma = \hbar W_{i \rightarrow f} = 2\pi |\langle f | V | i \rangle|^2 \rho(E_f), \quad (8.69)$$

причем для входящего в (8.69) матричного элемента имеем выражение

$$\langle f | V | i \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} U_1 \lambda_e^{1/2} \cos \delta_0, \quad (8.70a)$$

в котором два последних множителя — это нормировочный множитель волновой функции основного состояния и значение в начале координат волновой функции непрерывного спектра. В рассматриваемом одномерном случае плотность конечных состояний вычислена по формуле

$$\rho(E_f) = \frac{1}{\hbar} \frac{dp}{dE} = \frac{m}{2\pi\hbar^2 k}. \quad (8.70б)$$

Подставляя (8.70) в (8.69) и используя невозмущенные значения для  $\lambda_e$  и  $\cos \delta_0$ , получаем в точности первое слагаемое в формуле (8.68в). Так, конечно, и должно было быть, так как второе слагаемое имеет второй порядок малости по возмущению  $U_1$ , а рассматриваемая формула теории возмущений справедлива только в первом порядке.

### § 10. Задача рассеяния, соответствующая распаду каона

Другой поучительный пример дает нам задача рассеяния пионов на пионах в одном измерении; считается, что рассеяние возникает от взаимодействия каонов с пионами, ответственного за распады каонов. Это взаимодействие может перевести начальное двухпионное состояние в однокаонное состояние, а затем снова в двухпионное состояние.

Возьмем гамильтониан, уже рассмотренный в гл. 7, посвященной теории распада каонов:

$$H = H_K + H_\pi + V, \quad (8.71а)$$

где

$$H_K = \int E_{Kq} a_{Kq}^\dagger a_{Kq} dq, \quad (8.71б)$$

$$H_\pi = \int E_{\pi q} a_{\pi q}^\dagger a_{\pi q} dq. \quad (8.71в)$$

Импульсную переменную  $q$  мы здесь рассматриваем как одномерную. Взаимодействие  $V$  возьмем в виде локального взаимодействия (7.13а):

$$V = g \int dx a_\pi^\dagger(x) a_\pi^\dagger(x) a_K(x) + \text{эрмит. сопр.} \quad (8.72)$$

Отметим сразу же, что излагаемая нами теория рассеяния пионов на пионах не имеет никакого отношения к рассеянию физических пионов, так как имеющееся сильное взаимодействие реальных пионов полностью доминирует над их слабым взаимодействием (7.13а). Кроме того, мы используем здесь нерелятивистское приближение, совершенно непригодное для пионов в этой области

энергий. Нашу теорию следует применять в тех случаях, когда рассеяние двух нерелятивистских частиц объясняется наличием для них некоторого метастабильного состояния, которое может распадаться на две частицы, т. е. наличием резонанса.

Будем рассматривать рассеяние пионов на пионах в системе центра масс, т. е. в состоянии с полным импульсом, равным нулю. Тогда единственное каонное состояние, которое может у нас быть, — это каонное состояние с нулевым импульсом, потому что импульс сохраняется в процессе взаимодействия. Далее, чтобы удобнее было оперировать с локальным взаимодействием, представим оба оператора рождения пионов в конфигурационном пространстве функциями каких-то двух переменных  $y$  и  $z$ . Будем искать решение уравнения Шредингера в следующем виде:

$$|\psi\rangle = \left| \int \alpha(y-z) a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) dy dz + \beta a_{K_0}^{\dagger} \right| |0\rangle; \quad (8.73)$$

входящие сюда коэффициенты  $\alpha(y-z)$  и  $\beta$  можно определить, исходя из условия, что функция (8.73) удовлетворяет уравнению Шредингера. Для состояния с нулевым импульсом функция  $\alpha$  зависит только от разности координат  $y-z$  обоих пионов.

Запишем теперь гамильтониан (8.71) через переменные, характеризующие волновую функцию (8.73), а именно через координаты пионов и импульс каона. Взаимодействие  $V$  является функцией координат всех частиц. Мы поэтому используем преобразование Фурье, т. е. перейдем от координаты каонного оператора к импульсной переменной, а пионные операторы оставим без изменения и будем писать их в зависимости от  $y$  и  $z$ , как в волновой функции (8.73). Кроме того, введем в гамильтониан взаимодействия в виде множителя функцию  $\delta(y-z)$ . Тогда получим

$$V = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} g \int dy \int dz \int dq a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) \times \\ \times a_{Kq} e^{\frac{1}{2}iq(y+z)} \delta(y-z) + \text{эрмит. сопр.} \quad (8.74)$$

Гамильтониан свободных каонов (8.71б) имеет уже требуемую форму, однако гамильтониан свободных пионов (8.71в) нужно еще преобразовать к переменным в конфигурационном пространстве. Для упрощения этих преобразований предположим, что у нас имеется нерелятивистское соотношение

$$E_{\pi q} = mc^2 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m}. \quad (8.75)$$

Данное приближение позволит нам использовать нерелятивистское уравнение Шредингера в конфигурационном пространстве. (Нашу теорию, конечно, легко обобщить на случай, когда пионы описываются уравнением Клейна — Гордона.)

Гамильтониан свободных пионов (8.71в) можно теперь легко записать в конфигурационном пространстве. Действительно, имеем

$$H_{\pi} = \frac{1}{2\pi} \int dx \int dx' \int dq \left[ mc^2 + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \right] e^{-iqx} a_{\pi}^{\dagger}(x) e^{iqx'} a_{\pi}(x'), \quad (8.76a)$$

откуда получаем

$$H_{\pi} = \frac{1}{2\pi} \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \int dx' \int dq \left[ mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] e^{iq(x'-x)} a_{\pi}(x'). \quad (8.76b)$$

Проводя интегрирование по  $q$  и  $x'$ , окончательно находим

$$H_{\pi} = \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \int dx' \left[ mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \delta(x' - x) a_{\pi}(x'), \quad (8.77a)$$

$$H_{\pi} = \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \left[ mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] a_{\pi}(x). \quad (8.77b)$$

Подставим теперь волновую функцию (8.73) в уравнение Шредингера и вычислим сначала  $H_{\pi} |\psi\rangle$ , используя формулы (8.77b) и (8.73). В результате получим

$$H_{\pi} |\psi\rangle = \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \left[ mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \times \\ \times a_{\pi}(x) \int dy \int dz \alpha(y-z) a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) |0\rangle. \quad (8.78a)$$

Переносим оператор уничтожения направо, а также используя бозонные коммутационные соотношения, имеем

$$H_{\pi} |\psi\rangle = \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \left[ mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \times \\ \times \int dy \int dz \alpha(y-z) [\delta(x-y) a_{\pi}^{\dagger}(z) + \delta(x-z) a_{\pi}^{\dagger}(y)] |0\rangle. \quad (8.78b)$$

Интегрирования по переменным  $y$  и  $z$  можно переставить во втором слагаемом второй строки формулы (8.78b); тогда первое и второе слагаемые можно объединить в одно, и мы получим формулу

$$H_{\pi} |\psi\rangle = \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \left[ mc^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \int dy \int dz \times \\ \times [\alpha(y-z) + \alpha(z-y)] \delta(x-y) a_{\pi}^{\dagger}(z) |0\rangle. \quad (8.78b)$$

Формула (8.78b) прекрасно иллюстрирует требования симметрии, возникающие в связи с тем, что пионы подчиняются бозе-статистике. Если функция  $\alpha(y-z)$  нечетная, то двухпионная компонента в волновой функции (8.73) обращается в нуль. Только четная часть функции  $\alpha(y-z)$  обладает физическим смыслом, и поэтому ниже мы предположим, что функция  $\alpha(y-z)$  четная. Интегри-

рование по  $y$  в (8.78в) легко выполнить, если использовать имеющуюся функцию  $\delta(x - y)$ ; в результате будем иметь

$$H_{\pi}|\psi\rangle = \int dx a_{\pi}^{\dagger}(x) \left[ 2mc^2 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} \right] \int dz \alpha(x-z) a_{\pi}^{\dagger}(z) |0\rangle. \quad (8.79)$$

Чтобы представить в явном виде выражение  $V|\psi\rangle$ , заметим, что

$$\begin{aligned} V a_{\mathbf{K}0}^{\dagger} |0\rangle &= (2\pi)^{-1/2} g \int dy \int dz \int dq a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) e^{\frac{i}{2} i q(y+z)} \delta(q) \times \\ &\times \delta(y-z) |0\rangle = (2\pi)^{-1/2} g \int dy \int dz a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) \delta(y-z) |0\rangle, \quad (8.80a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V \int dy \int dz \alpha(y-z) a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) |0\rangle &= \\ &= 2(2\pi)^{-1/2} g^* \int dy \int dz \int dy' \int dz' \int dq \delta(y-y') \delta(z-z') \times \\ &\times \alpha(y-z) \delta(y'-z') e^{-\frac{i}{2} i q(y+z)} a_{\mathbf{K}q}^{\dagger} |0\rangle = \\ &= 2(2\pi)^{-1/2} g^* \int dz \int dq \alpha(0) e^{-i q z} a_{\mathbf{K}q}^{\dagger} |0\rangle = \\ &= 2(2\pi)^{1/2} \alpha(0) g^* a_{\mathbf{K}0}^{\dagger} |0\rangle. \quad (8.80b) \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} V|\psi\rangle &= (2\pi)^{-1/2} \beta g \int dy \int dz a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z) \times \\ &\times \delta(y-z) |0\rangle + 2\alpha(0) g^* (2\pi)^{1/2} a_{\mathbf{K}0}^{\dagger} |0\rangle. \quad (8.81) \end{aligned}$$

Кроме того, мы имеем

$$H_{\mathbf{K}}|\psi\rangle = \beta m_{\mathbf{K}} c^2 a_{\mathbf{K}0}^{\dagger} |0\rangle. \quad (8.82)$$

Используя формулы (8.79), (8.81) и (8.82), мы можем теперь уравнение Шредингера для состояния (8.73) записать в явном виде:

$$\begin{aligned} (H - E)|\psi\rangle = 0 &= \int dy \int dz [a_{\pi}^{\dagger}(y) a_{\pi}^{\dagger}(z)] |0\rangle \times \\ &\times \left\{ \left[ 2mc^2 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dy^2} - E \right] \alpha(y-z) + (2\pi)^{-1/2} \beta g \delta(y-z) \right\} + \\ &+ a_{\mathbf{K}0}^{\dagger} |0\rangle \{ (m_{\mathbf{K}} c^2 - E) \beta + 2\alpha(0) g^* (2\pi)^{1/2} \}. \quad (8.83) \end{aligned}$$

Приравнивая по отдельности нулю коэффициенты при каонном и пионном состояниях, мы получаем уравнения для коэффициентов  $\beta$  и  $\alpha(y-z)$ :

$$(m_{\mathbf{K}} c^2 - E) \beta + 2\alpha(0) g^* (2\pi)^{1/2} = 0, \quad (8.84a)$$

$$\left[ 2mc^2 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dy^2} - E \right] \alpha(y-z) + (2\pi)^{-1/2} \beta g \delta(y-z) = 0. \quad (8.84b)$$



Исключая  $\beta$  из этих двух уравнений, находим уравнение для  $\alpha$ :

$$\left[ 2mc^2 - \frac{\hbar^2}{m} \frac{d^2}{dx^2} - E \right] \alpha(x) = \frac{2|g|^2}{(m_K c^2 - E)} \delta(x) \alpha(0), \quad (8.85a)$$

где

$$x = y - z \quad (8.85b)$$

означает относительную координату двух пионов.

Уравнение (8.85a) — просто уравнение Шредингера для частицы, движущейся в дельта-потенциале с приведенной массой  $1/2m$ ; его можно записать в виде

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] \alpha = -U_0 \delta(x), \quad (8.86a)$$

где

$$k^2 = \frac{m}{\hbar^2} [E - 2mc^2] \quad (8.86b)$$

и

$$U_0 = \frac{2m|g|^2}{\hbar^2(m_K c^2 - E)}. \quad (8.86b)$$

Таким образом, мы вывели одночастичное уравнение Шредингера, исходя из вторично квантованного гамильтониана (8.71a). Мы как бы выполнили операцию, обратную вторичному квантованию. Дело в том, что в теории вторичного квантования исходят из одночастичного уравнения Шредингера и развивают на его основе формализм, необходимый для описания системы многих частиц с учетом возможности процессов их рождения и уничтожения. Мы же сейчас, если можно так сказать, «вторично деквантовали» гамильтониан (8.71a) и получили из него одночастичное уравнение (8.86).

В § 6 настоящей главы мы уже построили решение уравнения (8.86) и поэтому здесь сразу напомним

$$\alpha(x) = \cos(k|x| + \delta_0), \quad (8.87a)$$

причем здесь сдвиг фазы  $\delta_0$  дается формулой (8.34a):

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{U_0}{2k} = \frac{m|g|^2}{\hbar^2 k (m_K c^2 - E)}. \quad (8.87b)$$

Амплитуду рассеяния можно рассчитать, используя формулу (8.36a); в результате имеем

$$f(\theta) = \frac{1}{k(2k/U_0 - i)} = \frac{m|g|^2}{k\{\hbar^2 k(m_K c^2 - E) - im|g|^2\}}. \quad (8.88a)$$

Эту формулу можно представить в форме лоренцевой резонансной кривой

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \frac{\frac{1}{2} \Gamma}{(m_{\text{КК}} c^2 - E) - \frac{1}{2} i \Gamma}, \quad (8.88б)$$

причем

$$\Gamma = \frac{2m |g|^2}{\hbar^2 k}. \quad (8.88в)$$

Формула (8.88в) для  $\Gamma$  дает в точности ширину, которую можно получить, используя формулу «золотого правила» временной теории возмущений для вероятности перехода в единицу времени:

$$\frac{\Gamma}{\hbar} = \frac{2\pi}{\hbar} |g|^2 \rho(E); \quad (8.89а)$$

здесь плотность состояний в одномерном случае для «ящика» единичной длины определяется формулой

$$\rho(E) = \frac{1}{\hbar} \frac{dp}{dE} = \frac{2m}{\hbar p} = \frac{2m}{2\pi \hbar^2 k}. \quad (8.89б)$$

Таким образом, амплитуду пион-пионного рассеяния можно представить в форме резонансной кривой, ширина которой в точности совпадает с только что вычисленной по временной теории возмущений для рассматриваемого распадного состояния. Заметьте, однако, что формула (8.88в) абсолютно *точная*, так как мы при решении уравнения Шредингера для данного гамильтониана вообще не делали никаких приближений.

### § 11. Теория возмущений и $T$ -матрица

При решении одномерных задач рассеяния методом парциальных волн мы используем разложение (8.18) для представления точного решения в виде суммы двух парциальных волн для двух сдвигов фаз. В трехмерном случае мы имеем, к сожалению, бесконечное множество сдвигов фаз, и поэтому метод парциальных волн будет эффективным, если только мы сумеем получить замкнутые формулы для всех сдвигов фаз и если можно будет по каким-либо причинам пренебречь вкладом от всех парциальных волн выше некоторой  $l$ -волны.

Можно применить и совсем другой подход — строить решение уравнения Шредингера *по теории возмущений*, используя метод последовательных приближений. Здесь, однако, следует сразу же оговориться: непосредственное применение формул невременной теории возмущений, которые обычно используют при работе с задачами стационарных связанных состояний, наталкивается

на определенные трудности. Так, например, рассмотрим матричный элемент потенциала  $V$  в задаче рассеяния, взятый между точным решением (8.13) и невозмущенной плоской волной. Этот матричный элемент появляется во временной теории возмущений, и нужно уметь правильно его оценить. Используя уравнение Шредингера, имеем

$$\langle e^{\pm ikx} | V | \psi^{(+)}(x) \rangle = \langle e^{\pm ikx} | H - H_0 | \psi^{(+)}(x) \rangle, \quad (8.90a)$$

и поскольку  $\psi^{+}(x)$  — собственная функция гамильтониана  $H$  с собственным значением  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , то

$$H | \psi^{(+)}(x) \rangle = E | \psi^{(+)}(x) \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} | \psi^{(+)}(x) \rangle. \quad (8.90b)$$

Так как  $e^{\pm ikx}$  — собственные функции эрмитового оператора  $H_0$ , соответствующие одному и тому же собственному значению  $E$ , то

$$\langle e^{\pm ikx} | H_0 = E \langle e^{\pm ikx} | = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle e^{\pm ikx} |. \quad (8.90v)$$

Таким образом,

$$\langle e^{\pm ikx} | V | \psi^{(+)}(x) \rangle = \langle e^{\pm ikx} | \psi^{(+)}(x) \rangle (E - E) = 0. \quad (8.91)$$

Совершенно очевидно, что это неверно. Но в чем же тогда дело? Где ошибка? Подумайте над этим и пока не читайте дальше!

По-другому эта же самая трудность проявляется следующим образом. Возьмем уравнение, которое можно получить чисто алгебраическим преобразованием из уравнения Шредингера:

$$\Psi = \frac{1}{E - H_0} V \Psi. \quad (8.92)$$

Уравнение (8.92) можно далее взять в качестве исходного для развития теории возмущений. Подставляя в правую часть (8.92) волновую функцию нулевого порядка, мы можем получить волновую функцию первого порядка, а также построить в последующих приближениях и остальные функции более высоких порядков. Однако обязательно существуют собственные функции оператора  $H_0$  с собственным значением  $E$ , и оператор  $1/(E - H_0)$  бессмыслен в применении к этим волновым функциям. Таким образом, формально оперировать с формулой (8.92) нам не удастся.

Все эти трудности возникают потому, что мы используем волновые функции, заданные во всем пространстве, а они *квадратично не интегрируемы* (их нормировочный интеграл обращается в бесконечность). Один из известных способов избежать эти трудности — использовать «нормировку волновых функций на ящик конечных размеров». Тогда мы получим дискретный спектр энергетических уровней и дозволённые значения  $k$ , определяемые из граничных условий, налагаемых на собственные функции (8.9) на границах ящика. Поскольку дозволённые значения  $k$  зависят от сдвигов

фаз, то собственные значения  $E$  точного гамильтониана  $H$  будут обязательно отличаться от собственных значений невозмущенного гамильтониана  $H_0$ . Матричные элементы (8.90а) мы сможем теперь очень легко вычислить, причем не возникнет никаких несурзностей; у нас не появятся также и обращающиеся в нуль знаменатели в формуле (8.92). Но при этом возникнет другая трудность: граничные условия будут давать нам разные значения  $k$  для состояний с четной и нечетной четностями, т. е. будет снято основное наше двукратное вырождение собственных состояний. Собственные функции четности давали нам единственный удобный базис со специфическими свойствами, который мы широко эксплуатировали выше. Теперь же у нас нет удобных собственных функций, описывающих состояния с одной падающей волной и двумя рассеянными волнами. Этого, конечно, надо было ожидать, так как для выполнения граничного условия мы должны преобразовать расходящиеся волны в сходящиеся, затем опять в расходящиеся волны и так до бесконечности. Функции, «нормированные на ящик», таким образом, очень не удобны для проведения конкретных вычислений в задаче рассеяния.

Мы можем, разумеется, использовать временную теорию рассеяния с волновыми пакетами, размазанными по конечным областям пространства; тогда мы получим возможность построить непротиворечивую теорию, которая даже больше соответствует экспериментам по рассеянию, проводимым в лаборатории, чем та теория, которой мы занимаемся. Но все же при всех ее достоинствах временная теория необычайно сложна. Несомненно, проще работать с невременными плоскими волнами и стационарными собственными функциями (8.13); нужно только суметь правильно выбрать нормировку.

Обсуждаемые трудности мы здесь обойдем, заменив обычные условия ортогональности и нормировки для функций дискретного спектра так называемым «условием нормировки на  $\delta$ -функцию»:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ih'x} e^{ih''x} dx = 2\pi\delta(k' - k''). \quad (8.93)$$

Функция Дирака  $\delta(k' - k'')$  — очень экстравагантна; она равна нулю всюду, кроме точки  $k' - k'' = 0$ , в которой обращается в бесконечность. Эта функция очень удобна при проведении конкретных вычислений. Разумеется, она никогда не входит в окончательные формулы, дающие значения физических, экспериментально измеримых величин, так как появляется только в подынтегральных выражениях, берущихся по «промежуточным» состояниям. При этом сингулярности  $\delta$ -функций всегда пропадают после интегрирования, которые необходимо провести, чтобы получить физические

ские результаты. Так, например, чтобы из формул, в которые входят состояния, описываемые плоскими волнами, получить формулы для физических величин, описываемых волновыми пакетами, необходимо конструировать волновые пакеты из плоских волн; при этом у нас как раз и возникают интегралы по переменным, являющимся аргументами  $\delta$ -функций.

Имеются два типа вкладов в матричные элементы от состояний, описываемых плоскими волнами: 1) *сингулярные* вклады вроде (8.93), у которых бесконечный объем пространства входит в окончательную формулу в качестве множителя, в результате чего и возникает  $\delta$ -функция; 2) *несингулярные* вклады, даваемые сходящимися интегралами, плавно зависящими от  $k$ . В такие интегралы входят вклады от конечных областей пространства [как, например, в интеграл в левой части (8.90а)] или же вклады от областей на больших расстояниях, причем в последнем случае подынтегральные выражения достаточно быстро убывают, чтобы обеспечить сходимость интеграла в бесконечных пределах. Как сингулярные, так и несингулярные вклады дают разумные результаты после интегрирования их по  $k$ .

Разрешим теперь парадокс с формулой (8.91), т. е. правильно вычислим интеграл, стоящий в правой части (8.90а). Используя (8.90б), но ни в коем случае не (8.90в), получаем

$$\begin{aligned} \langle e^{\pm ikx} | V | \psi^{(+)}(x) \rangle &= \int_{-X}^{+X} e^{\mp ikx} (H - H_0) \psi^{(+)}(x) dx = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-X}^{+X} e^{\mp ikx} \left( k^2 + \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi^{(+)}(x) dx. \end{aligned} \quad (8.94a)$$

Теперь нужно проявить большую осторожность, если мы хотим перенести действие дифференциального оператора налево, как в формуле (8.90в), в случае ненормируемых состояний. Стандартный прием, с помощью которого мы можем заставить дифференциальный оператор в (8.94а) действовать налево, состоит в интегрировании по частям. Если сделать два таких интегрирования, то мы действительно сможем подействовать дифференциальным оператором  $d^2/dx^2$  на плоские волны  $e^{\mp ikx}$ , что даст нам вклад, который в точности компенсирует слагаемое  $k^2$ , и мы получим нуль в полном согласии с «наивной» формулой (8.91). Но ведь при каждом интегрировании по частям появляются подстановки. Они обращались бы в нуль, если бы волновые функции убывали на больших расстояниях, но функции, описывающие плоские волны, очевидно, так себя не ведут. Поэтому подстановки при интегрировании по частям оказываются конечными, и в результате

мы получаем следующую формулу:

$$\langle e^{\pm ikx} | V | \psi^{(+)}(x) \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} e^{\mp ikx} \left( \frac{d\psi^{(+)}}{dx} \pm ik\psi^{(+)}(x) \right) \Big|_{-x}^x. \quad (8.94б)$$

Подставляя сюда выражение (8.13а) для  $\psi^{(+)}(x)$ , видим, что невозмущенная плоская волна дает одинаковые вклады на обоих пределах  $X$  и  $-X$  и поэтому не дает никакого вклада в правую часть (8.94б). Ненулевой вклад возникает от рассеянной волны, которая распространяется в том же направлении, что и плоская волна, стоящая слева в матричном элементе. Используя волновую функцию (8.19в), находим

$$\langle e^{ikx \cos \alpha} | V | \psi_{\beta}^{(+)}(x) \rangle = \frac{ik\hbar^2}{m} g(\alpha - \beta), \quad (8.95)$$

причем здесь  $\alpha = 0$  или  $\pi$  и  $\beta = 0$  или  $\pi$ .

Итак, мы теперь нашли правильное выражение для матричных элементов оператора  $V$  между всевозможными состояниями рассеяния (8.19) и состояниями, описываемыми плоскими волнами. Подчеркнем, что это не обычные выражения для матричных элементов оператора, поскольку они взяты между состояниями разных базисов.

Формулу (8.95) можно пересчитать в какой-нибудь один базис, скажем в базис невозмущенных плоских волн, если рассмотреть некоторый новый оператор. Это знаменитая « $T$ -матрица», которую здесь мы определим формулой

$$V\psi_{\alpha}^{(+)} = T\phi_{\alpha}, \quad (8.96а)$$

где  $\phi_{\alpha}$  — невозмущенное состояние, являющееся плоской волной и соответствующее точному решению  $\psi_{\alpha}^{(+)}$ , т. е.

$$\phi_{\alpha} = e^{ikx \cos \alpha}. \quad (8.96б)$$

Матричные элементы оператора  $T$  можно вычислить непосредственно с помощью формулы (8.95), что даст

$$\langle \phi_{\beta} | T | \phi_{\alpha} \rangle = \frac{ik\hbar^2}{m} g(\alpha - \beta). \quad (8.97)$$

С помощью  $T$ -матрицы можно полностью описать процесс рассеяния, так как вся информация о нем заключена в элементах  $T$ -матрицы.  $S$ - и  $T$ -матрицы связаны друг с другом, как это видно из формул (8.97) и (8.20в), соотношением

$$S_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{m}{ik\hbar^2} T_{\alpha\beta}. \quad (8.98)$$

Здесь возможно небольшое недоразумение. Формально определенная с помощью (8.98)  $T$ -матрица имеет ненулевые матричные элементы также и между состояниями с различными энергиями.

Вместе с тем  $S$ -матрица, определенная (8.20в), связывает друг с другом только состояния с одинаковой энергией. Дело в том, что формулы (8.97) и (8.98) относятся только к таким матричным элементам, которые берутся между состояниями с одинаковой энергией.

Когда потенциала нет,  $T$ -матрица обращается в нуль, т. е. в этом случае нет никакого рассеяния; в то же время  $S$ -матрица превращается в единичную матрицу. В соотношении (8.98), связывающем  $S$ - и  $T$ -матрицы, из-за разной размерности этих величин числовой множитель в трехмерном случае будет другим.

Можно получить еще одно выражение для  $S$ -матрицы, если вычислить непосредственно скалярные произведения состояний (8.20б) с рассеянными расходящимися волнами и состояний (8.22а) с рассеянными сходящимися волнами. Эти скалярные произведения имеют сингулярности, которые происходят от областей пространства, не занятых потенциалом. В результате вычислений находим

$$\langle \psi_{\gamma}^{(-)} | \psi_{\alpha}^{(+)} \rangle = \sum_{\theta=0, \pi} \int_0^{\infty} dr \left[ \sum_{\beta=1, 2} \phi_{\beta}^{*}(\pi - \theta) S_{\beta\gamma} e^{i\theta r} + \phi_{\gamma}^{*}(\theta) e^{-i\theta r} \right] \times \\ \times \left[ \phi_{\alpha}(\pi - \theta) e^{-i\theta r} + \sum_{\beta=1, 2} S_{\alpha\beta} \phi_{\beta}(\theta) e^{i\theta r} \right] = S_{\alpha\gamma} \times 2 \int_0^{\infty} dr. \quad (8.99)$$

Появившийся расходящийся интеграл можно выразить через  $\delta$ -функцию, если вычисление провести с функциями  $\psi_{\alpha}^{(+)}$  и  $\psi_{\gamma}^{(-)}$  с немного отличными значениями  $k$  и если непосредственно воспользоваться соотношением (8.93). Таким образом, матричный элемент  $S$ -матрицы для перехода  $\alpha \rightarrow \gamma$  равен скалярному произведению решения с расходящимися рассеянными волнами и решения со сходящимися волнами, относящимися к невозмущенным состояниям  $\alpha$  и  $\gamma$  соответственно.

## § 12. Функции Грина и борновский ряд

Объясним теперь, как развивать теорию возмущений для задачи рассеяния и почему действительно нельзя использовать для этого непосредственно формулу (8.92). Теория возмущений дает приближение к такому точному решению уравнения Шредингера, которое соответствует невозмущенному решению, взятому в виде плоской волны. Там, однако, не нужно рассматривать *любое* точное решение уравнения Шредингера, так как нужно только такое решение, которое имеет вид (8.20б), т. е. решение с расходящимися волнами, добавленными к невозмущенной плоской волне.

Нам вовсе не требуется решение вида (8.22а), имеющее также и *сходящиеся* волны в дополнение к невозмущенной плоской волне. При отсутствии потенциала, когда  $g(\theta) = 0$  и  $S_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ , обе формулы (8.20б) и (8.22а) становятся идентичными и оба даваемых ими решения совпадают. С этими решениями совпадает и любая линейная комбинация решения (8.20б) и (8.22а). Следовательно, *данному невозмущенному решению*, т. е. решению уравнения Шредингера для свободной частицы, соответствует несколько разных решений уравнения Шредингера с взаимодействием (не только решение, отыскиваемое нами, в котором взаимодействие создает расходящиеся волны, но и другие решения, в которых взаимодействие создает сходящиеся волны). *Нет никакого взаимнооднозначного соответствия решений невозмущенного и возмущенного уравнений Шредингера.*

Теория возмущений обязательно столкнется, таким образом, с неопределенностями, если мы будем ее использовать бездумно для нахождения решения возмущенного уравнения Шредингера, которое соответствует данному решению невозмущенного уравнения Шредингера. Эта неоднозначность отражается в наличии знаменателя в формуле (8.92), который может обращаться в нуль. Именно поэтому у нас и не получилось никакого разложения теории возмущений. Чтобы найти правильные формулы теории возмущений, мы должны изменить нашу исходную постановку задачи и искать не просто решение возмущенного уравнения Шредингера, которое соответствует данному невозмущенному состоянию, но такое решение, которое, кроме того, имеет только расходящиеся волны. Подобной задачи вообще не возникает, когда волновые функции «нормируются на ящик», так как тогда обязательно существует взаимнооднозначное соответствие между возмущенными и невозмущенными решениями; при этом формула (8.92) не содержит никаких не обращающихся в нуль знаменателей.

Искомые формулы теории возмущений можно легко найти, если воспользоваться точным решением для дельта-потенциала, уже рассмотренным выше. Подставляя потенциал (8.32) и решение (8.36) в уравнение Шредингера (8.30), получаем

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 + U_0 \delta(x) \right] \left[ e^{ikh} + \frac{iU_0}{2k - iU_0} e^{ihr} \right] = 0, \quad (8.100a)$$

причем это соотношение можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] e^{ihr} = \frac{i\hbar^2 k}{m} \delta(x). \quad (8.100б)$$

Формулу (8.100б) можно использовать как выражение для дельта-потенциала, берущегося в точке  $x'$ , не обязательно совпадающей с началом координат. Для этого в формулу (8.100б) надо просто



подставить  $x - x'$  вместо  $x$ , что даст

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] e^{ik|x-x'|} = \frac{i\hbar^2 k}{m} \delta(x-x'). \quad (8.100в)$$

Теперь нам удобно рассмотреть «функции Грина»

$$G^\pm(x, x') = \frac{m}{i\hbar^2 k} e^{\pm ik|x-x'|}. \quad (8.101a)$$

Как видно из (8.100в), функции  $G^\pm(x, x')$  удовлетворяют уравнениям

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] G^\pm(x, x') = \delta(x-x'). \quad (8.101б)$$

Основываясь на интуитивном соображении, что любой потенциал  $V(x)$  можно построить из континуального набора дельта-потенциалов, сосредоточенных в различных точках  $x'$  и взятых с различными «силами»  $V(x')$ , мы можем записать наше уравнение Шредингера в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right] \psi(x) &= V(x) \psi(x) = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} V(x') \delta(x-x') \psi(x') dx'. \end{aligned} \quad (8.102a)$$

Используя далее уравнения (8.101б) для функций Грина  $G^\pm(x, x')$ , которые являются решениями для дельта-потенциала, мы можем теперь выписать формальные решения нашего уравнения Шредингера (8.102a) в виде

$$\psi_\alpha^{(\pm)}(x) = \phi_\alpha + \int_{-\infty}^{+\infty} G^\pm(x, x') V(x') \psi_\alpha^{(\pm)}(x') dx'. \quad (8.102б)$$

Функции  $\psi_\alpha^{(\pm)}(x)$  будут удовлетворять уравнению Шредингера (8.30б), если  $\phi_\alpha$  — любое решение уравнения Шредингера для свободной частицы. Иногда это выражают по-другому: уравнение (8.30б) рассматривают как *неоднородное* уравнение. Добавляя любое решение однородного уравнения к заданному решению неоднородного уравнения, мы получаем еще одно решение неоднородного уравнения.

Уравнение (8.30б), однако, на самом деле не является неоднородным уравнением, так как его «неоднородный член» содержит линейно саму неизвестную функцию  $\psi$ . Поэтому формула (8.102б) в действительности не есть *решение* нашего уравнения, так как  $\psi$  входит как в правую, так и в левую части (8.102б). Правда, для дельта-потенциала формула (8.102б) даст нам решение, так

как  $\psi$ , взятое в одной точке, есть просто число, которое можно всегда найти из условия нормировки. Для любого другого потенциала волновая функция  $\psi(x)$  выступает как неизвестная функция, и ее значения можно найти, только разрешая уравнение. Таким образом, переходя к формуле (8.102б), мы просто преобразуем уравнение Шредингера в некоторое *интегральное уравнение*, которое еще надо решить, чтобы получить  $\psi(x)$ .

Интегральное уравнение (8.102б) отличается от исходного уравнения Шредингера в одном полезном для нас отношении. Любое решение интегрального уравнения (8.102б) будет также решением уравнения Шредингера, но не всякое решение уравнения Шредингера будет решением рассматриваемого интегрального уравнения. Мы построили уравнение (8.102б) с таким расчетом, чтобы оно давало нам только те решения исходного уравнения Шредингера, которые обладают требуемыми асимптотическими свойствами при больших значениях  $x$ ; мы требовали, чтобы каждое такое решение содержало заданную невозмущенную волну  $\phi_\alpha$  и, кроме того, *расходящиеся* рассеянные волны (но не сходящиеся волны) в случае функции  $G^+(x, x')$  и *сходящиеся* волны в случае функции  $G^-(x, x')$ . Это достигается выбором первого слагаемого в (8.102б) в виде невозмущенной волновой функции и выбором соответствующих функций Грина  $G^+$  или  $G^-$  в интеграле, который является решением (8.101б), содержащим только сходящиеся или только расходящиеся волны. Можно получить много других решений уравнения Шредингера, если заменить первое слагаемое в (8.102б) на любое решение уравнения Шредингера для свободной частицы, а также если заменить функции Грина  $G^\pm(x, x')$  на любые решения уравнения (8.101б).

Уравнение (8.102б) можно взять в качестве исходного для развития теории возмущений. С его помощью мы избавились от неопределенностей, присущих уравнению (8.92), которое не может различить решения (8.20б) и (8.22а). Разложим волновую функцию (8.102б) в ряд теории возмущений. При этом рассмотрим  $\psi^{(*)}(x)$  и возьмем в качестве нулевой функции  $\phi_\alpha$  невозмущенную волну  $e^{ikx}$ . Обозначим через  $\psi_n$  член  $n$ -го порядка в ряду теории возмущений:

$$\psi^{(*)}(x) = e^{ikx} + \psi_1 + \psi_2 + \dots + \psi_n + \dots \quad (8.103)$$

Этот ряд можно построить из (8.102б) методом последовательных приближений. Подставляя член нулевого порядка в интеграл в правой части уравнения (8.102б), для левой части получаем сумму членов нулевого порядка и первого порядка (последний член содержит интеграл). Подставив эту поправку в интеграл в правой части, находим невозмущенное решение плюс тот же самый член первого порядка и плюс член второго порядка (который пропорционален квадрату потенциала). Каждое новое приближе-

ние будет давать следующий более высокий член разложения теории возмущений. При этом приближенное решение любого порядка будет обладать требуемыми асимптотическими свойствами, т. е. представлять собой сумму невозмущенной плоской волны и расходящихся рассеянных волн. Полученный методом последовательных приближений ряд называется «борновским рядом для амплитуды рассеяния». Член первого порядка в нем называют «борновским приближением». Мы, следовательно, имеем в точности тот же результат, какой получился бы у нас, если бы мы использовали формулу «золотого правила» первого порядка временной теории возмущений.

Проведенное подробное обсуждение одномерного случая позволяет сказать многое и о трехмерной задаче рассеяния: мы можем получить правильное представление о ней, используя лишь совсем немного математики. Важно, однако, еще раз напомнить и о различиях между одномерным и трехмерным случаями, которые проистекают исключительно из соображений размерности. Аналоги уравнений (8.100в) и (8.101б) для функций Грина содержат *трехмерные*  $\delta$ -функции, а также расходящиеся и сходящиеся *трехмерные* волны, имеющие вид  $e^{\pm ikr}/r$ . Одномерная  $\delta$ -функция имеет такую же размерность, как  $1/r$ , а расходящаяся и сходящаяся волны для свободной частицы безразмерны. В трехмерном случае  $\delta$ -функция имеет размерность  $1/r^3$ , а решения для свободной частицы в виде расходящихся и сходящихся волн — размерность  $1/r$ . Появление множителя  $k$  в правой части (8.100в) объясняется, таким образом, исключительно размерностными соображениями, т. е. учитывается, что мы имеем дело с одномерным, а не с трехмерным случаем. Зависимость от импульса, имеющаяся в формуле (8.101а), определяющей одномерную функцию Грина, исчезает в трехмерном случае.

Обратимся теперь к формальному разложению в ряд теории возмущений решения уравнения (8.92) и немного изменим это уравнение, чтобы полностью устранить всякие трудности и неоднозначности и получить уравнение, формально эквивалентное интегральному уравнению (8.102б).

Запишем произведение  $V\psi$  в виде (8.102а) и представим  $\delta$ -функцию интегралом Фурье. Тогда получим

$$\begin{aligned} V(x)\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') V(x') \psi(x') = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{ik'(x-x')} V(x') \psi(x'). \end{aligned} \quad (8.104)$$

Далее мы можем написать формулу

$$\frac{1}{E - H_0} e^{ik'x} = \frac{2m}{\hbar^2 (\kappa^2 - k'^2)} e^{ik'x}, \quad (8.105a)$$

в которой

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E. \quad (8.105b)$$

Подставляя (8.104) и (8.105) в правую часть уравнения (8.92), получаем

$$\frac{1}{E - H_0} V(x) \psi(x) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{e^{ik'(x-x')}}{(\kappa - k')(\kappa + k')} V(x') \psi(x'). \quad (8.106a)$$

Как видим, трудности, связанные с наличием сингулярного знаменателя  $E - H_0$ , все еще присутствуют в формуле (8.106a) и проявляются в ней в наличии сингулярных знаменателей в подынтегральном выражении. Вместе с тем, если мы добавим к  $E$  малую мнимую добавку, которую затем устремим к нулю, то сможем легко вычислить приведенный интеграл. С добавлением мнимой добавки подынтегральное выражение остается конечным вдоль пути интегрирования, так как полюсы смещаются в комплексную плоскость с действительной оси. Поскольку подынтегральное выражение аналитично на комплексной плоскости  $k'$ , за исключением точек полюсов при  $k' = \pm \kappa$ , то интеграл по  $k'$  удобно вычислить методом контурного интегрирования, т. е. замыкая наш путь интегрирования, идущий вдоль действительной оси бесконечной полуокружностью в верхней или нижней полуплоскости. Вклад от полуокружности в контурный интеграл обращается в нуль, если эта полуокружность расположена в верхней полуплоскости при положительных значениях  $x - x'$  и в нижней полуплоскости при отрицательных значениях  $x - x'$ . При этом контурный интеграл оказывается равным вычету в соответствующем полюсе  $k' = \kappa$  или  $k' = -\kappa$ . Один из них лежит в верхней полуплоскости и дает вклад в интеграл при положительных  $x - x'$ . Другой расположен в нижней полуплоскости и дает вклад в интеграл при отрицательных  $x - x'$ . Какой из этих двух полюсов  $\pm \kappa$  лежит в верхней, а какой в нижней полуплоскости, зависит от знака мнимой добавки к  $\kappa$ , но не зависит от ее величины. Таким

образом, мы получаем следующие два значения нашего интеграла:

$$\frac{1}{E-H_0} V(x) \psi(x) = \frac{m}{i\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{i\kappa|x-x'|}}{\kappa} V(x') \psi(x') \quad \text{при } \text{Im } \kappa > 0, \quad (8.106б)$$

$$\frac{1}{E-H_0} V(x) \psi(x) = \frac{m}{i\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{e^{-i\kappa|x-x'|}}{\kappa} V(x') \psi(x') \quad \text{при } \text{Im } \kappa < 0. \quad (8.106в)$$

Подынтегральные выражения в правых частях (8.106б) и (8.106в) содержат как раз функции Грина  $G^{\pm}(x, x')$ , определенные формулой (8.101а). Формулу (8.106) можно записать в виде одной формулы

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E-H_0 \pm i\varepsilon} V(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' G^{\pm}(x, x') V(x') \psi(x'). \quad (8.107)$$

Подставляя этот результат в формулу (8.102б), получаем

$$\psi_{\alpha}^{(\pm)}(x) = \phi_{\alpha}(x) + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E-H_0 \pm i\varepsilon} \psi_{\alpha}^{(\pm)}(x), \quad (8.108)$$

т. е. формальное операторное представление интегрального уравнения (8.102б).

Мы «исправили» таким образом уравнение (8.92): добавили малую мнимую добавку к  $E$ , которую затем устремили к нулю, а также добавили «решение однородного уравнения»  $(E - H_0) \psi = 0$ . Знак мнимой добавки определяется нашим выбором одного из решений: со сходящимися или с расходящимися рассеянными волнами.

Уравнение (8.108) можно использовать, чтобы получить интегральное уравнение для  $T$ -матрицы. Умножая уравнение (8.108), взятое для  $\psi_{\alpha}^{(+)}$ , на  $V$  и вспоминая определение (8.96а)  $T$ -матрицы, будем иметь

$$V\psi_{\alpha}^{(+)}(x) = T\phi_{\alpha}(x) = V\phi_{\alpha}(x) + V \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} T\phi_{\alpha}(x), \quad (8.109)$$

причем здесь мы использовали обозначения, обычно применяемые в теории рассеяния; предел  $\varepsilon \rightarrow 0$  мы подразумеваем и не выписываем явно.

Интегральное уравнение для матричных элементов  $T$ -матрицы можно получить сразу, если взять скалярное произведение состоя-

ния (8.109) и любого невозмущенного состояния  $\phi_\beta$ . Так мы приходим к следующему операторному уравнению:

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} T. \quad (8.110)$$

Согласно формуле (8.96а),  $T$ -матрица имеет матричные элементы также и между состояниями, не обладающими одинаковыми энергиями. Однако только матричные элементы между состояниями с одинаковой энергией, которые даются формулой (8.97), можно сопоставить с физически наблюдаемой амплитудой рассеяния. Разумеется, операторное соотношение (8.110) должно иметь также и матричные элементы между состояниями с разными энергиями, поскольку оператор  $V$  имеет такие матричные элементы. Мы уже видели, что при вычислении подынтегральных выражений в интегралах в формулах (8.106а) и (8.106б) необходимо использовать все значения  $k'$ .

Формулу (8.110) можно взять в качестве исходной при построении правильных формул теории возмущений для элементов  $T$ -матрицы. Невозмущенное значение для  $T$  просто  $T = 0$ . Подставляя это невозмущенное значение в правую часть (8.110), получаем приближение первого порядка  $T = V$ , которое в точности соответствует борновскому приближению. Продолжая эту процедуру, будем получать приближения все более и более высоких порядков.

Соотношение между формулами (8.108) и (8.102б) очень характерно для двух формулировок квантовой механики. *Аналитический* подход (начавшийся со Шредингера) использует дифференциальные и интегральные уравнения, а также и другие аналитические средства. Напротив, *алгебраический* подход (начавшийся с Гейзенберга) использует матрицы, а также векторы состояний и операторы в гильбертовом пространстве и другие алгебраические средства. Физические результаты, полученные этими двумя методами, всегда оказываются эквивалентными друг другу. Если какой-либо результат получен в рамках одного подхода, его всегда легко можно перевести на язык другого подхода. Какой именно подход лучше использовать в данной конкретной задаче, определяется характером ее, а также личными вкусами исследователя. Изучающему квантовую механику нужно, конечно, освоиться с обоими подходами. Если он встретится с какой-либо трудностью при одном подходе, то всегда сможет посмотреть на нее с другой стороны, что может оказаться весьма полезным. В разбираемом сейчас случае трудность появилась в алгебраическом подходе; она была связана с формулой (8.92). Нам удалось избавиться от этой трудности, когда мы обратились к аналитическому подходу и получили формулу (8.102б). Затем полученный результат мы «перевели» обратно на язык алгебры и получили эквивалентное (8.102б) уравнение (8.107).

### § 13. Частица в одномерном периодическом потенциале

Метод сдвигов фаз, который использовался нами в задачах рассеяния, можно также успешно применить в задаче о частице, движущейся в одномерном периодическом потенциале. Такая задача формально получается из задачи рассеяния (8.6), если включить в последнюю бесконечное число потенциалов, идентичных потенциалу  $V(x)$ , но расположенных на одинаковых расстояниях друг от друга с интервалом  $a \geq 2X$ . Этот новый периодический потенциал будет описываться следующей функцией:

$$V_p(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} V(x-na), \quad (8.111a)$$

причем для гамильтониана имеем выражение

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_p(x). \quad (8.111б)$$

Гамильтониан типа (8.111б) часто используется при описании движения электронов в кристаллической решетке, в которой ионы создают периодически изменяющееся в пространстве электрическое поле.

Гамильтониан  $H$  инвариантен относительно трансляции  $x \rightarrow x + a$ , так что если  $\psi(x)$  — какая-либо собственная функция гамильтониана  $H$ , то  $\psi(x+a)$  будет тоже его собственной функцией с тем же самым собственным значением, т. е.

$$H\psi(x) = E\psi(x), \quad (8.112a)$$

$$H\psi(x+a) = E\psi(x+a). \quad (8.112б)$$

Когда значение энергии  $E$  невырождено, тогда оба решения (8.112a) и (8.112б) будут описывать одно и то же состояние и могут отличаться друг от друга только множителем. Последний должен по модулю обязательно равняться единице, поскольку  $\psi(x+a)$  и  $\psi(x)$  по предположению одинаково нормированы. Таким образом,

$$\psi(x+a) = e^{i\phi}\psi(x). \quad (8.113)$$

Функцию, удовлетворяющую этому условию, можно записать в следующем виде:

$$\psi_k(x) = e^{ikx}u_k(x), \quad (8.114a)$$

причем

$$\phi = ka, \quad (8.114б)$$

а  $u_k(x)$  — периодическая функция с периодом  $a$ , т. е.

$$u_k(x+a) = u_k(x). \quad (8.114в)$$

Как видим, взятая в таком виде волновая функция представляет собой произведение волновой функции для свободной частицы и некоторой периодической функции, с помощью которой учитываются эффекты влияния потенциала. Указанные волновые функции называют «блеховскими волнами»; их широко используют для описания движения электронов проводимости в кристаллической решетке.

Когда потенциал есть четная функция от  $x$ , то он инвариантен при отражении относительно начала координат:

$$V(x) = V(-x). \quad (8.115)$$

При этом гамильтониан (8.116) и четность  $P$  можно одновременно диагонализировать. Используя полученные результаты для одномерных задач рассеяния, рассмотренных в предыдущих параграфах этой главы, мы можем ожидать, что и в настоящей задаче будет двукратное вырождение собственных функций<sup>1)</sup> и что можно взять в качестве исходных собственные функции четности, описывающие стоячие волны, или же блеховские волновые функции (8.114а), описывающие бегущие волны.

Изучим теперь свойства блеховских волн и при этом разоведем для них теорию, подобную той, которая применялась уже нами в задачах рассеяния, а именно используем метод сдвигов фаз, чтобы описать эффекты влияния потенциала на изменение формы волновых функций. Если нам известно решение, задаваемое в виде блеховской волны на отрезке  $-1/2a \leq x \leq 1/2a$ , и если мы знаем значение фазы  $\phi$ , т. е. блеховского волнового числа  $k$ , то, используя условие периодичности (8.113) [или эквивалентное ему условие (8.114)], мы можем построить решение всюду на действительной оси. Следовательно, нам нужно только решить уравнение Шредингера в области  $|x| \leq 1/2a$ . Однако в области  $|x| \leq 1/2a$  периодический потенциал идентичен с потенциалом из задачи рассеяния [см. (8.6)], и уже найденное выше решение можно поэтому непосредственно использовать для нашего периодического потенциала.

Если мы продолжим какое-либо решение задачи рассеяния, рассматриваемое в области  $|x| \leq 1/2a$ , с помощью условия периодичности (8.113), то получим некоторое решение дифференциального уравнения Шредингера для нашего периодического потен-

<sup>1)</sup> Когда собственное значение  $E$  вырождено, тогда, вообще говоря, нельзя требовать, чтобы собственные функции имели вид (8.113) или (8.114). Однако в этом случае можно найти такие операторы, которые осуществляют трансляции  $x \rightarrow x + a$  и коммутируют с гамильтонианом (8.116). Все это подробно обсуждается в гл. 14. Таким образом, всегда (во всех случаях) можно найти базис собственных функций гамильтониана  $H$ , которые будут также и собственными функциями операторов трансляций и, следовательно, будут иметь вид (8.114).



циала; оно будет, вообще говоря, разрывным в точках  $x = n + \frac{1}{2}a$ . Чтобы построить правильное решение, т. е. решение непрерывное с непрерывной первой производной, нужно найти такое решение уравнения Шредингера в области  $|x| \leq \frac{1}{2}a$ , которое удовлетворяет условию периодичности (8.113) как граничному условию, налагаемому на значения функции и ее производных в точках  $x = \pm \frac{1}{2}a$ . Решение будет тогда непрерывным само и будет иметь непрерывную производную, если мы продолжим его вне области  $|x| \leq \frac{1}{2}a$  на всю действительную ось с помощью условия периодичности (8.113).

Периодические граничные условия, взятые в виде блоховской волны, удобно сформулировать, представляя решение в виде линейной комбинации собственных функций четности, т. е. в виде

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \psi_1(x), \quad (8.116a)$$

где  $\psi_0(x)$  и  $\psi_1(x)$  — собственные функции гамильтониана  $H$  с четной и нечетной четностями соответственно, причем они не нормированы. Таким образом,

$$\psi(-x) = \psi_0(x) - \psi_1(x). \quad (8.116b)$$

Производные этого решения имеют вид

$$\psi'(x) = \psi'_0(x) + \psi'_1(x), \quad (8.117a)$$

$$\psi'(-x) = -\psi'_0(x) + \psi'_1(x). \quad (8.117b)$$

Наложим теперь условие периодичности (8.113) на функции  $\psi(x)$  и  $\psi'(x)$  в точках  $x = \pm \frac{1}{2}a$ , т. е. потребуем, чтобы

$$\frac{\psi\left(+\frac{1}{2}a\right)}{\psi\left(-\frac{1}{2}a\right)} = \frac{\psi_0 + \psi_1}{\psi_0 - \psi_1} = e^{ika}, \quad (8.118a)$$

$$\frac{\psi'\left(+\frac{1}{2}a\right)}{\psi'\left(-\frac{1}{2}a\right)} = \frac{\psi'_0 + \psi'_1}{-\psi'_0 + \psi'_1} = e^{ika}, \quad (8.118b)$$

причем здесь мы использовали сокращенные обозначения  $\psi_0, \psi'_0, \psi_1, \psi'_1$  для значений функций  $\psi(x)$  и  $\psi'(x)$  при  $x = \pm \frac{1}{2}a$ . Скомбинировав эти равенства, получим следующие соотношения:

$$\frac{\psi_0 + \psi_1}{\psi_0 - \psi_1} - \frac{\psi'_0 + \psi'_1}{-\psi'_0 + \psi'_1} = 0 = \psi_1 \psi'_1 - \psi_0 \psi'_0, \quad (8.119a)$$

$$\cos ka = \frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\psi_0 + \psi_1}{\psi_0 - \psi_1} + \frac{\psi'_1 - \psi'_0}{\psi'_1 + \psi'_0} \right] = \frac{\psi_0 \psi'_1 + \psi_1 \psi'_0}{\psi_0 \psi'_1 - \psi_1 \psi'_0}, \quad (8.119b)$$

причем здесь мы воспользовались (8.119a), чтобы упростить (8.119b).

Соотношения (8.119) описывают граничные условия, налагаемые на решение уравнения Шредингера, рассматриваемое в области  $|x| \leq \frac{1}{2}a$ , причем для их формулировки мы использовали собственные функции с четной и нечетной четностями. Последние можно взять непосредственно из задачи рассеяния, поскольку они в точности такие, как и соответствующие решения для периодического потенциала на этом отрезке. Таким образом, используя формулы (8.9), которые справедливы при  $|x| \geq \frac{1}{2}a$ , а потому и при  $|x| = \frac{1}{2}a$ , имеем

$$\psi_0 = A \cos \left( \frac{1}{2} ka + \delta_0 \right), \quad (8.120a)$$

$$\psi_1 = B \sin \left( \frac{1}{2} ka + \delta_1 \right), \quad (8.120б)$$

$$\psi'_0 = -\kappa A \sin \left( \frac{1}{2} ka + \delta_0 \right), \quad (8.120в)$$

$$\psi'_1 = \kappa B \cos \left( \frac{1}{2} ka + \delta_1 \right), \quad (8.120г)$$

где  $A, B$  — некоторые постоянные и

$$\kappa = (2mE/\hbar)^{\frac{1}{2}}. \quad (8.120д)$$

Волновое число  $\kappa$  не надо путать с блоховским волновым числом  $k$ , определенным в (8.114). Правда, для свободной частицы  $\kappa = k$ , но при наличии периодического потенциала граничные условия (8.119) как раз определяют вид того соотношения, которое связывает  $\kappa$  и  $k$ , т. е. они задают конкретный вид соотношения между энергией и импульсом.

Теперь мы можем подставить значения (8.120) в граничные условия (8.119). При этом предварительно отметим, что

$$2\psi_0\psi'_0 = -\kappa A^2 \sin(\kappa a + 2\delta_0), \quad (8.121a)$$

$$2\psi_1\psi'_1 = \kappa B^2 \sin(\kappa a + 2\delta_1), \quad (8.121б)$$

$$2\psi_0\psi'_1 = \kappa AB \cos(\kappa a + \delta_0 + \delta_1) + \cos(\delta_0 - \delta_1), \quad (8.121в)$$

$$2\psi'_0\psi_1 = \kappa AB \cos(\kappa a + \delta_0 + \delta_1) - \cos(\delta_0 - \delta_1). \quad (8.121г)$$

Подставляя (8.121) в (8.119), получаем соотношения

$$B^2 \sin(\kappa a + 2\delta_1) + A^2 \sin(\kappa a + 2\delta_0) = 0, \quad (8.122a)$$

$$\cos \kappa a = \frac{\cos(\kappa a + \delta_0 + \delta_1)}{\cos(\delta_0 - \delta_1)}; \quad (8.122б)$$

последнее соотношение можно представить в виде

$$\cos(\kappa a + \delta_0 + \delta_1) = \cos \kappa a \cos(\delta_0 - \delta_1). \quad (8.122в)$$

В левой части обоих соотношений (8.122б) и (8.122в) стоят косинусы, значения которых ограничены по абсолютной величине единицей. В правую часть (8.122в) входит произведение косинусов, т. е. она тоже по модулю должна быть меньше единицы. Таким образом, для каждого данного блоховского волнового числа  $k$  всегда существует свое значение  $\kappa$ , определяемое из соотношения (8.122в), а потому обязательно существует некоторое решение уравнения Шредингера. Следовательно, блоховское волновое число  $k$  может принимать все значения, т. е.  $k$  имеет непрерывный спектр так же, как и импульс свободного электрона.

В правой части (8.122б) стоит отношение двух косинусов. Оно может стать больше единицы при некоторых значениях  $\kappa$ , и тогда из уравнения (8.122б) нельзя будет найти никакого значения  $k$ . Соответственно энергетический спектр будет иметь «зонную структуру» с разрывами сплошности и запрещенными областями как раз в тех местах, где правая часть (8.122б) оказывается большей единицы. Если значения  $\kappa$  или энергию  $E$  отложить на графике в зависимости от блоховского волнового числа  $k$ , то соответствующая кривая будет иметь разрывы по  $\kappa$  и  $E$  на некоторых фиксированных значениях  $k$ .

#### § 14. Особенности зонного спектра

Уравнения (8.122) мы получили, исходя только из общих соображений симметрии, и нам не нужно было делать никаких предположений о виде потенциала  $V(x)$ . Действительно, в граничные условия (8.119) входит не потенциал  $V(x)$ , а только два параметра, определяемые решениями уравнения Шредингера, рассматриваемыми во внутренней области, а именно две логарифмические производные для решений с четной и нечетной четностями, взятые при  $x = \frac{1}{2}a$ . Оба параметра непосредственно выражаются через сдвиги фаз соответствующей задачи рассеяния. Таким образом, уравнение (8.122б), из которого находится зонная структура спектра, содержит функции, выраженные только через сдвиги фаз, причем в них не входят никакие другие характеристики решений уравнения Шредингера или потенциала  $V(x)$ .

Воспользуемся теперь формулой (8.122б) из § 13, чтобы описать характерные особенности зонного спектра. Функция  $\cos(\kappa a + \delta_0 + \delta_1)$  осциллирует между значениями  $-1$  и  $+1$ . На максимумах и минимумах этих осцилляций, когда косинус равен  $\pm 1$ , уравнение (8.122б) не будет иметь решения для  $k$ , если  $\delta_0 \neq \delta_1$ . Запрещенные области около экстремальных значений, как видно из (8.122б), определяются условием

$$-|\delta_0 - \delta_1| < (\kappa a + \delta_0 + \delta_1 - n\pi) < |\delta_0 - \delta_1|, \quad (8.123a)$$

причем здесь  $n$  — целое число, выбранное так, чтобы абсолютное значение выражения  $ka + \delta_0 + \delta_1 - n\pi$  было минимальным.

На границах запрещенных областей (8.123а), как это видно из уравнений (8.122), решения имеют следующий вид:

$$B = 0 \text{ и } ka = n\pi = (ka + \delta_1 + \delta_0) + (\delta_0 - \delta_1) \text{ при } ka = n\pi - 2\delta_0, \quad (8.123б)$$

$$A = 0 \text{ и } ka = n\pi = (ka + \delta_1 + \delta_0) - (\delta_0 - \delta_1) \text{ при } ka = n\pi - 2\delta_1. \quad (8.123в)$$

Запрещенные области возникают, таким образом, всякий раз, когда  $ka = n\pi$ , и они появляются в виде скачков в значениях  $ka$  от  $n\pi - 2\delta_0$  до  $n\pi - 2\delta_1$ . На границах запрещенных зон блоховские волны оказываются собственными функциями четности с нечетной четностью при  $ka = n\pi - 2\delta_0$  и четной четностью при  $ka = n\pi - 2\delta_1$ .

Когда  $ka + \delta_0 + \delta_1 = (n + 1/2)\pi$ , правая и левая части уравнения (8.122в) обращаются в нуль. Таким образом,

$$ka = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi = ka + \delta_0 + \delta_1 \text{ при } ka = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi - \delta_0 - \delta_1. \quad (8.123г)$$

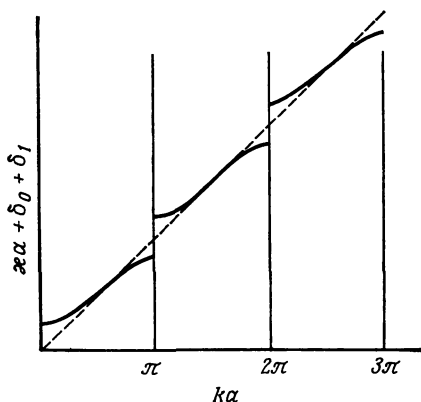
В окрестности этих точек (8.122в) становится неравенством

$$|ka + \delta_0 + \delta_1 - \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi| \leq \left|ka - \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\right|. \quad (8.123д)$$

Энергетический спектр блоховских волн, таким образом, состоит из чередующихся разрешенных и запрещенных зон. Запрещенные зоны получаются при блоховских волновых числах, равных  $ka = n\pi$ , т. е. когда укладывается целое число полуволин на каждом периоде решетки. График кривой  $ka + \delta_0 + \delta_1$  в зависимости от  $ka$  имеет вид, показанный на фиг. 8.1. Пунктирная линия на нем изображает прямую  $ka + \delta_0 + \delta_1 = ka$ ; точки  $ka = (n + 1/2)\pi$  лежат на ней, как это ясно из (8.123г), однако наклон кривой  $ka + \delta_0 + \delta_1$  меньше единицы, что следует из (8.123д). При  $ka = n\pi$  эта кривая совершает скачки от значения, расположенного на  $|\delta_0 - \delta_1|$  ниже пунктирной кривой, до значения, расположенного на  $|\delta_0 - \delta_1|$  выше этой кривой. Запрещенные значения  $ka + \delta_0 + \delta_1$  лежат между этими двумя значениями.

Можно показать, что именно описанная нами сейчас зонная структура электронного спектра ответственна за классификацию твердых тел на проводники и диэлектрики. Твердое тело — проводник тогда, когда в нем электроны могут двигаться свободно. В отсутствие приложенного электрического поля, конечно, не будет отличного от нуля среднего тока, так как число электронов,

движущихся в каком-либо одном направлении, в точности равно числу электронов, движущихся в противоположном направлении. Приложенное электрическое поле нарушает этот баланс путем перевода большего числа электронов в состояния, в которых они движутся в направлении поля (при условии, конечно, что энергетические уровни с очень малой энергией возбуждения доступны для электронов). Свободные электроны обладают непрерывным энергетическим спектром, и потому всегда имеются уровни,



Фиг. 8.1. Типичный зонный спектр для периодического потенциала.

доступные для них при очень малых возбуждениях (расположенные выше наибольшего заполненного уровня). Однако для электронов, движущихся в периодическом потенциале, т. е. обладающих зонной структурой энергетического спектра, не будет уровней с малыми энергиями возбуждения, если электроны точно заполняют некоторое число разрешенных энергетических зон. Возбуждения с самыми малыми энергиями возбуждения соответствуют переходам электронов через запрещенную область. Слабое внешнее поле никак не может возбудить такие возбуждения, так что твердые тела, в которых полное число электронов таково, что они в точности заполняют некоторое число разрешенных зон, будут *диэлектриками*. Твердые тела, в которых «пограничная» зона только частично заполнена электронами, будут *проводниками*.

### § 15. Динамика решетки. Блоховские электроны и фононы

В реальном кристалле потенциал, который чувствует на себе отдельный электрон, не строго периодический. Ионы могут немного смещаться из их равновесных положений в решетке. Мы можем,

однако, учесть эти смещения, если немного изменим форму потенциала (8.111а), позволив каждому иону  $n$  немного сместиться на расстояние  $\xi_n$  из своего положения равновесия, т. е. если возьмем потенциал вида

$$V(x, \xi_n) - \sum_n V(x - na - \xi_n) \approx V_p(x) - \sum_n \xi_n \frac{\partial V(x - na)}{\partial x}. \quad (8.124)$$

Поскольку смещения ионов малы, мы можем разложить потенциал  $V(x, \xi_n)$  в ряд Тейлора и сохранить только члены первого порядка малости.

Смещения  $\xi_n$  являются не заданными параметрами, а *динамическими переменными*, изменение которых должен описывать наш гамильтониан. Поэтому мы должны обобщить гамильтониан, включив в него слагаемые, описывающие электроны, ионы и взаимодействие между электронами и ионами:

$$H = H_e + H_I + H_{\text{int}}. \quad (8.125a)$$

В гамильтониан свободных электронов мы включим оператор кинетической энергии электрона и первое слагаемое из правой части (8.124), т. е. положим

$$H_e = \frac{p^2}{2m} + V_p(x). \quad (8.125b)$$

Гамильтониан свободных ионов мы возьмем в виде суммы кинетических энергий всех ионов и потенциалов межйонных сил. Так как смещения  $\xi_n$  малы, то мы разложим межйонный потенциал по степеням  $\xi_n$  и сохраним только члены второго порядка малости. Постоянную мы отбросим, изменив нуль отсчета энергии. Линейных членов никаких не будет, так как смещения  $\xi_n$  отсчитываются от равновесных положений. Таким образом,

$$H_I = \sum_n \frac{\pi_n^2}{2M} + \sum_{nn'} C_{nn'} \xi_n \xi_{n'}, \quad (8.125b)$$

где  $\pi_n$  — импульс, канонически сопряженный с  $\xi_n$ , а  $M$  — масса иона. Величины  $C_{nn'}$  — некоторые постоянные в разложении периодического потенциала. Так как потенциал зависит только от взаимных расстояний между взаимодействующими ионами, а не от абсолютных положений индивидуальных ионов в решетке, то постоянные  $C_{nn'}$  зависят только от разностей  $n - n'$ .

Оператор взаимодействия электронов с ионами содержит только одно слагаемое в рассматриваемом нами сейчас приближении,

а именно второе слагаемое из правой части (8.124), т. е.

$$H_{\text{int}} = - \sum_n \xi_n \frac{\partial V}{\partial x} (x - na). \quad (8.125г)$$

Указанное слагаемое возникло у нас как результат учета влияния смещения ионов на вид потенциала, действующего на электроны, но то же самое взаимодействие управляет и движением ионов.

Хотя периодическая симметрия в движении электронов теперь нарушена, все равно имеется глобальная периодическая симметрия для твердого тела в целом. Рассмотрим преобразование динамических переменных, индуцированное трансляцией на период решетки  $a$ :

$$x \rightarrow x + a, \quad p \rightarrow p, \quad (8.126a)$$

$$\xi_n \rightarrow \xi_{n-1}, \quad \pi_n \rightarrow \pi_{n-1}. \quad (8.126б)$$

Гамильтониан (8.125), как непосредственно видно, инвариантен относительно этого преобразования, поскольку  $C_{nn'}$  зависит только от  $n - n'$ .

Рассмотрим далее систему, состоящую из конечного числа ионов, и воспользуемся периодическими граничными условиями, чтобы удовлетворить условию инвариантности при преобразовании (8.126б). (Оно одинаково в физике твердого тела и теории поля.) Предположим, что номер  $n$ , изменяясь на единицу, пробегает значения от  $-N$  до  $+N$ , и пусть  $\xi_N \equiv \xi_{-N}$  и  $\xi_{n \pm 2N} = \xi_n$ .

Выше мы уже видели, как может использоваться периодическая симметрия гамильтониана  $H_e$  при отыскании его собственных функций. Соображения периодической симметрии полезны также и при обработке гамильтониана  $H_I$ . Для этого надо преобразовать переменные  $\xi_n$  к переменным «нормальных координат», получаемым при диагонализации матрицы  $C_{nn'}$  с помощью некоторого определенного линейного преобразования в векторном пространстве динамических переменных  $\xi_n$ . Отметим, что гамильтониан свободных электронов был диагонализирован с помощью преобразования векторов в гильбертовом пространстве, а не в пространстве динамических переменных. Но соображения симметрии одинаково применимы к обоим случаям. Если какая-то матрица, которую нужно диагонализировать, инвариантна при определенном преобразовании, то надо искать собственные векторы этой матрицы, требуя, чтобы они были собственными векторами данного преобразования.

Как мы уже убедились на примере гильбертова пространства, собственные векторы трансляций — это как раз фурье-образы координат, подвергающихся трансляции, т. е. плоские волны.

Мы можем определить наши нормальные координаты следующим образом:

$$a_q = \frac{1}{2} (N\hbar\alpha_q)^{-1/2} \sum_{n=-N}^{N-1} (\xi_n + i\alpha_q\pi_n) e^{-iqna}, \quad (8.127a)$$

$$a_q^\dagger = \frac{1}{2} (N\hbar\alpha_q)^{-1/2} \sum_{n=-N}^{N-1} (\xi_n - i\alpha_q\pi_n) e^{iqna}; \quad (8.127b)$$

здесь  $\alpha_q$  — некоторые постоянные, зависящие от индекса  $q$ ; их нужно еще отыскать. Мы взяли такие линейные комбинации координат  $\xi_n$  и импульсов  $\pi_n$ , какие как раз являются нормальными координатами. Они удовлетворяют коммутационным соотношениям, имеющимся для операторов рождения и уничтожения. Значения  $q$  взяты такими, чтобы удовлетворялись периодические граничные условия, т. е.

$$q = \frac{n'\pi}{Na} \quad \text{при} \quad -N \leq n' \leq N-1, \quad (8.127в)$$

$$a_{q+2\pi/a} \equiv a_q. \quad (8.127г)$$

Функцию  $\alpha_q$  мы берем четной по  $q$ , т. е. требуем, чтобы

$$\alpha_q = \alpha_{-q}. \quad (8.127д)$$

Отметим, наконец, что имеет место важное условие ортогональности и нормировки

$$\sum_{q=-\pi/a}^{(1-N^{-1})\pi/a} e^{-iq(n-n')a} = 2N\delta_{nn'}. \quad (8.127e)$$

Переменные (8.127), как видно, суть собственные функции преобразования (8.126б) с собственными значениями  $e^{\pm iqa}$ . Используя условие ортогональности (8.127е), легко непосредственно убедиться, что операторы (8.127а) и (8.127б) удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям

$$[a_q, a_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}. \quad (8.127ж)$$

Записывая гамильтониан ионов (8.125в) через нормальные координаты, видим, что он принимает следующий вид:

$$H_I = \sum_q \frac{1}{2} \hbar\omega_q (a_q^\dagger a_q + a_q a_q^\dagger), \quad (8.128a)$$

причем

$$\omega_q = 2 \sum_r \alpha_q C_{0r} e^{iqra} = (M\alpha_q)^{-1}, \quad (8.128б)$$

$$\alpha_q = [2M \sum_r C_{0r} e^{iqra}]^{-1/2} \quad (8.128в)$$



и

$$C_{or} = C_{n, n+r}; \quad (8.128\text{г})$$

т. е. мы имеем в точности гамильтониан для системы свободных бозонов, причем соотношение между частотой и волновым числом отдельного бозона дается (8.128б).

Теперь гамильтониан взаимодействия (8.125г) тоже легко выразить через нормальные координаты, если перейти от потенциала к его фурье-образу:

$$\frac{\partial V}{\partial x}(x-na) \equiv \sum_q (N\hbar\alpha_q)^{-1/2} v_q e^{iq(x-na)}. \quad (8.129\text{а})$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} &= - \sum_q \sum_n (N\hbar\alpha_q)^{-1/2} v_q e^{iqx} \xi_n e^{-iqna} = \\ &= - \sum_q v_q e^{iqx} (a_q + a_{-q}^\dagger). \end{aligned} \quad (8.129\text{б})$$

Оператор взаимодействия (8.129б) описывает, таким образом, процессы изменения импульса электрона на величину  $\hbar q$ , сопровождающиеся либо поглощением бозона с волновым вектором  $q$ , либо рождением бозона с волновым вектором  $-q$ .

Теперь ясно видно, в чем заключается смысл периодической симметрии обобщенных дискретных трансляций (8.12б). Блоховское волновое число  $k$ , или импульс электрона, перестает быть интегралом движения, так как оно изменяется при взаимодействии (8.129б). Вместе с тем полный «закон сохранения импульса», конечно, справедлив, но при этом надо учитывать в нем также и фоновые переменные. Это нужно делать следующим образом.

Оператор  $e^{iqx}$ , входящий в (8.129б), описывает передачу импульса  $\hbar q$  электрону, и действие его понять просто, если электрон находится в собственном состоянии оператора импульса. Однако собственными функциями гамильтониана (8.125б) являются не обычные плоские волны, а блоховские волны (8.114); они не являются собственными состояниями оператора импульса, так как электрон, двигавшийся в любом потенциале, отличном от постоянного, будет непрерывно изменять свой импульс при прохождении через область, занятую потенциалом. Хотя волновой вектор  $k$ , характеризующий блоховскую волну, имеет формальное сходство с волновым вектором плоской волны, но он с ним имеет и существенные различия. Их можно проиллюстрировать, рассматривая матричный элемент оператора  $e^{iqx}$ , взятый между двумя блоховскими волновыми функциями, т. е. матричный элемент

$$\langle k' | e^{iqx} | k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_{k'}^*(x) e^{-ik'x} e^{iqx} e^{ikx} u_k(x) dx. \quad (8.130\text{а})$$

Если функции  $u_k(x)$  были бы постоянными, как это имеет место для плоских волн, то интеграл в правой части (8.130а) давал бы одну  $\delta$ -функцию, выражающую собой закон сохранения импульса. Но так как функции  $u_k(x)$  представляют собой не постоянные величины, а некоторые периодические функции с периодом  $a$ , то мы можем разложить их в ряд Фурье на этом интервале и подставить разложения в (8.130а). Таким образом, интеграл (8.130а) будет равен сумме  $\delta$ -функций, причем они дают вклады тогда, когда  $k' - k - q$  равняется разрешенному значению волнового числа для какой-нибудь компоненты ряда Фурье для функции  $u_k(x)$ . Таким образом,

$$\langle k' | e^{iqx} | k \rangle = \sum_n 2\pi \delta(k' - k - q - 2n\pi/a) \int_{-\frac{1}{2}a}^{\frac{1}{2}a} u_k^*(x) \times \\ \times e^{-i2n\pi x/a} u_k(x) dx. \quad (8.130б)$$

Мы предполагаем, что функции  $u_k(x)$  нормированы на интервале, простирающемся от  $-1/2a$  до  $+1/2a$ , причем они, вообще говоря, не ортогональны друг другу при разных значениях  $k$ , так как условие ортогональности имеет место для *полных* волновых функций (с учетом множителей  $e^{ikh}$ ).

Таким образом, блоховское волновое число, т. е. импульс в кристаллической решетке, сохраняется только с точностью до кратного  $2\pi/a$ . Это разумно, так как наш гамильтониан инвариантен не относительно группы непрерывных трансляций, а только относительно группы дискретных трансляций на векторы, кратные вектору решетки  $a$ . Следовательно, блоховское волновое число определено только с точностью до кратного  $2\pi/a$ . Трансляционную симметрию подробно мы будем еще обсуждать дальше в гл. 14.

Мы можем легко обобщить гамильтониан  $H$  на случай системы многих электронов (пока что он у нас написан только для одного электрона). Это обобщение провести просто, если мы не будем рассматривать кулоновского взаимодействия между электронами. Его действительно можно не рассматривать, если ограничимся приближением Хартри — Фока (см. гл. 9), в рамках которого учитывается только среднее взаимодействие данного электрона со всеми остальными электронами и пренебрегается флуктуациями средней плотности электронов. Среднее взаимодействие электронов друг с другом при этом учитывается просто путем должного изменения параметров периодического потенциала. Если с помощью  $c_k^\dagger$  и  $c_k$  мы обозначим операторы рождения и уничтожения блохов-

ского состояния с волновым вектором  $k$ , то вместо (8.1256) и (8.129) мы должны будем написать

$$H_e = \sum_k E_k c_k^\dagger c_k, \quad (8.131a)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_{k'nq} v_{knq} c_{k'+q+2n\pi/a}^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger), \quad (8.131b)$$

где

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} [\kappa(k)]^2, \quad (8.131v)$$

$$v_{knq} = \langle k+q+2n\pi/a | e^{iqx} | k \rangle v_q, \quad (8.131r)$$

а входящее сюда  $\kappa(k)$  дается формулой (8.122 в).

Гамильтониан, являющийся суммой (8.131) и (8.128), имеет формально в точности такой же вид, как феноменологический гамильтониан для описания процессов испускания и поглощения бозонов и для описания процессов распада [см. (4.2) и (7.12)]. Однако мы здесь не постулировали наш гамильтониан, а построили его в явном виде, исходя из предположенного вида электрон-ионного и ион-ионного взаимодействий. Мы вывели, а не ввели постулативным образом операторы (8.129) рождения и уничтожения отдельных решеточных колебаний (фононов) и убедились, что они действительно удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям. Мы также вывели и оператор взаимодействия, описывающий процессы испускания и поглощения фононов электронами. Параметры этого гамильтониана мы смогли непосредственно выразить через потенциальную функцию электрон-ионного взаимодействия.

Построенный нами одномерный электрон-фононный гамильтониан является удачным модельным гамильтонианом, который можно использовать при изучении многих интересных физических процессов.

*Электрон-фононное рассеяние.* Данный процесс возможен только во втором порядке теории возмущений. При этом в качестве начального надо взять состояние  $c_k^\dagger a_q^\dagger | 0 \rangle$ , а в качестве конечного — состояние  $c_{k'}^\dagger a_{q'}^\dagger | 0 \rangle$  (в каждом из них по одному электрону и по одному фонону). В качестве промежуточных могут выступать состояния  $c_{k''}^\dagger | 0 \rangle$  или  $c_{k''}^\dagger a_{q'}^\dagger a_{q'}^\dagger | 0 \rangle$  (либо не содержащие ни одного фонона, либо содержащие два фонона).

*Электрон-электронное рассеяние, сопровождаемое обменом фононом.* Данный процесс тоже возможен только во втором порядке теории возмущений. При этом в качестве начального надо взять состояние  $c_k^\dagger c_{k'}^\dagger | 0 \rangle$ , а в качестве конечного — состояние  $c_{k''}^\dagger c_{k'''}^\dagger | 0 \rangle$  (в каждом из них по два электрона). В качестве про-

межуточных могут выступать состояния  $c_{k'}^{\dagger} c_k^{\dagger} a_q^{\dagger} | 0 \rangle$  (каждое содержит по два электрона и по фонону). В результате мы получим некоторое эффективное электрон-электронное взаимодействие, являющееся точным аналогом в теории кристаллической решетки обычного электромагнитного взаимодействия (которое происходит от обмена электронами фотонами). Это электрон-электронное взаимодействие при посредничестве фононов кристаллической решетки может повести к корреляционному спариванию электронов, которое ответственно за явление сверхпроводимости.

*Полярон.* Это электрон, который создает вокруг себя потенциальную яму, появляющуюся за счет поляризации электроном окружающей решетки. (Электрон отталкивает отрицательные ионы и притягивает положительные.) Наш электрон затем начинает колебаться в этой яме и в то же время продолжает двигаться через решетку, т. е. «переносит» с собой свою яму. Задачу о поляроне можно изучать самыми различными методами.

# *VI. Проблема многих частиц в изложении для пешеходов (часть 2)*

## *Введение*

Главы 9—11 — это вторая, более трудная часть монографии по квантовой проблеме многих частиц. Правда, общие рассуждения в гл. 9 довольно просты, а изложение приближений Томаса — Ферми и Хартри — Фока все еще дается на достаточно элементарном уровне, чтобы его мог понять читатель, освоившийся только с материалом гл. 5, но еще не изучивший теорию композитных систем, временную теорию возмущений и теорию рассеяния (гл. 6—8). За исключением конца § 7 гл. 9, в котором говорится о  $T$ -матрице, более полное изложение теории парных корреляций, приводимое в гл. 10, тоже все еще остается достаточно элементарным, так что его сможет понять любой читатель, ознакомившийся с гл. 6, но еще не успевший изучить временную теорию возмущений и теорию рассеяния.

Теорию элементарных возбуждений в гл. 11 мы начинаем с обсуждения стационарных состояний и состояний гигантских резонансов. Все это можно понять на довольно элементарном уровне, используя приближение хаотических фаз в задачах как ядерной физики, так и физики твердого тела. Изложение правил сумм и временной теории элементарных возбуждений в § 9 и 10 гл. 11 проводится по аналогии с изложением временной теории эффекта Мессбауэра в гл. 3.

В § 11 гл. 11 читатель знакомится с математически более развитым формализмом теории спектральных функций и функций Грина. Эта теория возникла в квантовой проблеме многих частиц в результате перенесения в данную область математических методов, заимствованных из квантовой теории поля. Она излагается

в книге для ознакомления читателя с этими важными вопросами, прежде чем он начнет изучать в гл. 12 квантовую теорию поля и квантово-полевую теорию возмущений. Более полное обсуждение методов квантовой теории поля и их применений в проблеме квантовых многочастичных систем и в теории сверхпроводимости читатель найдет в прекрасной книге Дж. Шриффера<sup>1)</sup>.

---

<sup>1)</sup> *Schrieffer J. R., Theory of Superconductivity, Benjamin, New York, 1964.* (Имеется перевод: *Шриффер Дж., Теория сверхпроводимости, изд-во «Наука», М., 1970.*)

## Глава 9. ПРОБЛЕМА МНОГИХ ЧАСТИЦ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

### § 1. Введение

С проблемой многих частиц приходится сталкиваться в различных разделах современной физики. Для рассмотрения ее было развито много общих методов. Ниже, прежде чем приступить к изложению этой проблемы и методов, используемых при ее решении, мы начнем с ряда замечаний общего характера, которые помогут читателю хоть как-то разобраться в большом количестве путаницы, имеющейся в литературе по проблеме многих частиц.

1. *Никто не может точно решить эту проблему.* Основная черта всех задач проблемы многих частиц — никто не в состоянии решить их точно. Хорошо известно, что уже проблему трех частиц нельзя решить точно. Обязательно надо использовать какие-то приближения, чтобы получить хоть какой-нибудь ответ. Законность того или иного приближения при этом определяется, конечно, специфическими особенностями конкретной рассматриваемой физической задачи. На основе общего рассмотрения квантовой проблемы многих частиц, пригодного вообще для всех задач этой проблемы, конечно, нельзя выработать рекомендаций, какое именно приближение должно использоваться в той или иной конкретной ситуации. Читатель ниже в данной главе познакомится с элегантными методами, позволяющими решать задачи квантовой проблемы многих частиц, однако надо помнить, что эти методы не приводят к точному решению.

2. *Что же мы хотим найти? Определенно не точное решение!* Точное решение проблемы многих частиц не только невозможно построить, но оно нам и не нужно. Точная волновая функция многочастичной системы столь сложна и содержит столько ненужной информации, что требуется еще довольно много потрудиться, чтобы извлечь из нее небольшое количество желаемых сведений. Приближенные методы, обычно используемые, упрощают задачу за счет отбрасывания ненужной информации. Никого не интересует ряд последовательных приближений, который действительно сходится к точному решению уравнения Шредингера. Только очень немногие характеристики квантовой системы многих частиц интересны для экспериментальной физики, и мы всегда исполь-

уем такие методы, которые дают хорошее описание именно этих характеристик; в то же время они могут очень плохо описывать другие характеристики, а возможно, и вовсе их не описывать. Если в приближенном методе используются волновые функции, то они могут быть совсем плохими и вообще очень мало походить на точные волновые функции нашей многочастичной системы. Если бы мы попытались использовать эти волновые функции в качестве базисных для развития теории возмущений, то мог бы получиться даже расходящийся ряд. Тем не менее в каждой конкретной ситуации имеются веские причины для использования данного приближенного метода при теоретическом описании величин, представляющих физический интерес.

Теория квантовой проблемы многих частиц качественно, таким образом, отличается от теории квантовой проблемы нескольких частиц, например теории одного электрона в атоме водорода или двух электронов в атоме гелия. Теория простых атомов ставит своей целью отыскать точное решение задачи либо в виде замкнутого выражения, либо в виде ряда последовательных приближений. В этой теории исходят из гипотезы, что используемый приближенный метод дает сколь угодно точное приближение, если только мы достаточно долго поработаем в его рамках. В проблеме многих частиц ситуация иная. Точное решение настолько сложно, что обычные приближенные методы вовсе и не дают решения, которое сходится к точному решению или к чему-либо, хоть отдаленно напоминающему это решение. Точное решение проблемы многих частиц в действительности и не должно нас интересовать, поскольку оно содержит такую бездну информации о нашей многочастичной системе, которую хотя в принципе и можно получить из экспериментальных измерений, но которой фактически мы никогда не располагаем. В этом отношении квантовая проблема многих частиц напоминает проблему классической статистической механики: можно решить уравнения движения Ньютона и построить траектории для всех частиц данной классической многочастичной системы на всем бесконечном временном интервале, но только очень малая доля всей этой обширной информации имеет отношение к тому, что на практике действительно измеряется в лаборатории.

Классическая статистическая механика пользуется *статистическим методом* рассмотрения, в котором основную роль играют макроскопически измеримые величины (скажем, температура, давление, энтропия). Такое неполное описание системы считают вполне приемлемым, если только именно эти экспериментально измеримые величины и их поведение описываются достаточно точно. В квантовой проблеме многих частиц мы преследуем ту же самую цель, что и в соответствующей проблеме классической статистической механики. Нам требуется построить правильное



описание только *отдельных* характеристик системы, соответствующих величинам, которые действительно можно измерить в лаборатории. И тем не менее используемые нами формализмы при теоретических рассмотрениях квантовой проблемы многих частиц часто оказываются нацеленными именно на отыскание точного решения. Фактически многие теории, посвященные квантовой проблеме многих частиц, *навязывают неправильное представление о том, что они на самом деле дают методы построения приближений к точному решению уравнения Шредингера.*

Волновые функции, с которыми работают в квантовой проблеме многих частиц, оказываются очень плохими приближениями, если их оценивать по стандартам, заимствованным из задач проблемы небольшого числа частиц. Интеграл перекрытия практически любой используемой приближенной волновой функции с точной волновой функцией очень близок к нулю. Ряд теории возмущений, в котором в качестве функции нулевого порядка взята одна из указанных приближенных волновых функций, не сходится к точной волновой функции. Приближенные волновые функции в квантовой проблеме многих частиц считают хорошими, если они дают хорошие приближенные выражения для величин, представляющих непосредственный физический интерес. Поскольку эти величины составляют лишь малую толику полного объема информации, содержащейся в волновой функции, большая часть полной информации практически оказывается нам не нужной. Следовательно, нам совсем не важно, правильно или неправильно передает наша приближенная волновая функция ненужную долю информации.

3. *Сколько же частиц?* Существуют задачи двух разных типов в квантовой проблеме многих частиц: 1) для макроскопических многочастичных систем; 2) для атомных или ядерных систем. Каждая макроскопическая система содержит огромное число ча-

стиц  $N \approx 10^{23}$ , и эффекты порядка  $N^{-1}$  или  $N^{-\frac{1}{3}}$  обычно для нее очень малы. Поверхностными эффектами в такой системе вполне можно пренебречь (если только специально не интересоваться поверхностными явлениями). Атомы и атомные ядра содержат уже достаточное число частиц, а именно от 10 до 100. Конечно, это много по сравнению с тем, что мы имеем в атоме водорода или в дейтроне, однако здесь пренебрежение величинами порядка  $N^{-1}$

довольно сомнительно, а величины  $N^{-\frac{1}{3}}$  вообще порядка единицы. Поверхностные эффекты становятся в рассматриваемом случае важными. Если из 216 бильярдных шаров мы сделали бы куб, то 152 шара из них находились бы на поверхности куба и только 64 внутри. Поэтому кажется просто поразительным, что одни и те же приближенные методы одинаково успешно работают в при-

менении и к макроскопическим системам, и к атомам и ядрам. Очевидно, эти приближенные методы оказываются хорошими в обоих случаях по совершенно разным причинам.

4. *В чем же состоит проблема?* В некоторых задачах квантовой проблемы многих частиц требуется найти решение точно нам известного уравнения Шредингера. В других задачах даже точный вид гамильтониана системы нам не известен. В некоторых задачах в теории атомов или в теории твердого тела приходится изучать движение многочастичной системы под действием хорошо известных сил, например сил электромагнитного поля. В других задачах, например при исследовании структуры сложных атомных ядер, действующие силы нам не известны, и поэтому приходится прибегать к использованию модельных гамильтонианов, например гамильтониана модели ядерных оболочек. В эти модельные гамильтонианы входят параметры, значения которых нам не известны а priori; исходные значения данных параметров можно изменять, чтобы иметь возможность подогнать результаты теоретических вычислений под экспериментальные данные, проведенные в рамках данных модельных теорий. При этом физический смысл указанных параметров становится довольно неясным, если только мы делаем какие-либо неочевидные приближения при теоретических расчетах. Получается так, что даже тогда, когда наше приближение мы не можем оправдать, исходя из первых принципов, оно может очень хорошо работать на практике, если только мы допускаем возможность варьирования параметров в исходном модельном гамильтониане. Может случиться, что члены, пренебрегаемые в данном приближении, не настолько малы, чтобы ими можно было действительно пренебречь. Они могут влиять на окончательные результаты, но в точности таким же образом, как влияют на них изменения параметров рассматриваемого модельного гамильтониана. В таком случае можно говорить об «эффективном» гамильтониане, или о взаимодействии, каким-то непонятным образом вбирающем в себя эффекты, которые мы не собираемся или не можем обработать явно.

5. *Дискретный или непрерывный спектр?* В атомах и ядрах основное состояние и низко расположенные связанные состояния образуют «дискретные» множества, и энергии и характеристики собственных функций этих состояний можно непосредственно измерять экспериментально. Данные состояния описываются собственными функциями гамильтониана. Все свойства их в принципе можно установить, разрешая уравнение Шредингера с необходимой степенью точности и исследуя свойства полученных решений.

Для более высоких возбужденных состояний в атомах и ядрах и практически для всех возбужденных состояний в твердых телах приходится иметь дело с «непрерывным» спектром несвязанных состояний. Соответствующие им точные собственные функции гамильтониана, конечно, никогда не измеряют экспериментально, и они не представляют непосредственного физического интереса. Физически интересны возбужденные состояния, которые получаются экспериментально путем возбуждения основного состояния или статистической смеси низко лежащих состояний, отвечающих тепловому равновесию при некоторой фиксированной температуре. Экспериментальные возбуждения системы никогда не связаны с переходами системы из данного точного собственного состояния в небольшое число точных собственных состояний непрерывного спектра. Всегда эти исходные состояния переводятся в когерентные волновые пакеты, составленные из огромного числа точных собственных состояний непрерывного спектра. Данные волновые пакеты, как правило, обладают очень простыми свойствами, которые задаются как конкретным способом возбуждения их, так и структурой энергетических уровней многочастичной системы и ее собственных функций. Свойства этих так называемых «элементарных возбуждений» чрезвычайно важно изучать в теоретических и экспериментальных исследованиях квантовых многочастичных систем.

6. *Элементарные возбуждения.* Спектр возбуждений многочастичной системы очень сложен, поскольку рассматриваемая система имеет огромное число степеней свободы. Почти все эти возбуждения, однако, не представляют никакого физического интереса. Примерами таких «нефизических» возбуждений являются, скажем, все возможные возбуждения 12 миллионов частиц в системе, содержащей  $10^{23}$  частиц, или же хотя бы возбуждения 57 частиц в ядре, содержащем 122 нуклона. Большая часть экспериментов, проводимых над многочастичной системой, имеет дело с возбуждениями простого типа, возбуждаемыми падающей на систему электромагнитной волной или бомбардировкой ее какими-либо частицами. Свойства этих элементарных возбуждений особенно интересны нам, и основная цель многих теорий, посвященных квантовой проблеме многих частиц, как раз и состоит в изучении этих элементарных возбуждений, причем по возможности стараются не обращать внимания на другие эффекты, связанные с наличием большого числа степеней свободы в данной многочастичной системе.

При изучении элементарных возбуждений мы интересуемся изменением исходного состояния многочастичной системы, а не детальным описанием системы в состояниях до и после акта возбуждения. Сложные свойства многочастичной системы, которые

не изменяются при данном возбуждении, нас совсем не интересуют, и их можно либо игнорировать, либо описывать грубо и приближенно и даже очень плохо. В теории «функций Грина» и в теории «линеаризованных уравнений движения» имеют дело главным образом с операторами, которые рожают эти элементарные возбуждения, и стараются избежать (насколько это возможно) использования самих многочастичных волновых функций.

Квантовая проблема многих частиц подобна проблеме классической статистической механики: только небольшая доля информации, доставляемой полной динамической теорией, представляет непосредственный физический интерес. Математические теории в обоих случаях различаются потому, что волновые функции, обычно используемые в задачах квантовой проблемы многих частиц, содержат всю информацию о системе, но позволяют делать такие упрощающие приближения, которые дают очень плохое описание величин, не представляющих физического интереса. Эти приближения, как правило, чрезвычайно сложно оправдать строгими рассуждениями, поскольку пренебрегаемые члены не обязательно малы в обычном смысле. Необходимо только, чтобы их влияние на результаты, представляющие физический интерес, было мало и мы действительно имели бы правильное приближение.

## § 2. Невзаимодействующий ферми-газ

Почти все теории многофермионных систем начинаются с изучения свободного ферми-газа, в котором пренебрегают взаимодействием между отдельными частицами. Гамильтониан свободного не взаимодействующего ферми-газа можно представить в следующем виде:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma}, \quad (9.1)$$

где  $a_{k\sigma}^\dagger$  — оператор рождения частицы в состоянии, описываемом плоской волной с волновым вектором  $k$  и проекцией спина  $\sigma$ ;  $\epsilon_k$  — кинетическая энергия частицы с волновым числом  $k$ . Основное состояние данной системы мы получим, если будем заполнять частицами по-очереди, низко лежащие одночастичные энергетические уровни, пока у нас не кончатся все частицы. Значение  $k$  на верхней границе этого распределения называют «импульсом Ферми» и обозначают через  $k_F$ . Волновая функция «фермиевского волнового состояния», таким образом, дается выражением

$$|F\rangle = \prod_{\substack{|k| \leq k_F \\ \sigma}} a_{k\sigma}^\dagger |0\rangle. \quad (9.2a)$$

Это состояние можно также однозначно описать, требуя выполнения следующих соотношений:

$$a_k^\dagger |F\rangle = 0 \quad \text{при} \quad |k| \leq k_F, \quad (9.26)$$

$$a_k |F\rangle = 0 \quad \text{при} \quad |k| > k_F. \quad (9.27)$$

Простые возбужденные состояния нашей системы мы можем построить, возбуждая частицы выше уровня  $k_F$ ; эти состояния можно представить формулой

$$a_m a_k |F\rangle \quad \text{при} \quad |m| > k_F; \quad |k| \leq k_F, \quad (9.3a)$$

причем «энергия возбуждения» каждого такого состояния равна

$$E_{mk} = \varepsilon_m - \varepsilon_k. \quad (9.3b)$$

В формализме вторичного квантования обычно рассматривают фермиевское основное состояние как вакуумное. Остальные волновые функции представляют с помощью произведений операторов рождения и уничтожения, действующих на это фермиевское основное состояние. Тогда оператор  $a_m^\dagger$  в (9.3a) следует рассматривать как оператор, рождающий частицу выше ферми-распределения, а оператор  $a_k$  — как оператор, уничтожающий частицу или рождающий «дырку» в ферми-распределении. При этом для определения одночастичных энергий часто вычитают несущественную энергетическую постоянную из гамильтониана  $H$ , чтобы сделать одночастичную энергию  $\varepsilon_k$  равной нулю при  $k$ , равном ферми-импульсу  $k_F$ . Тогда собственные значения гамильтониана будут давать непосредственно энергии возбуждения, отсчитываемые от энергии основного состояния. Энергию  $\varepsilon_m - \varepsilon_F$  можно интерпретировать как энергию, необходимую для образования частицы выше ферми-распределения, а энергию  $\varepsilon_F - \varepsilon_k$  — как энергию, необходимую для рождения дырки в ферми-распределении. Энергию, требуемую для возбуждения состояния (9.3), можно, таким образом, записать в виде суммы энергии частицы и энергии дырки, т. е.

$$E_{mk} = (\varepsilon_m - \varepsilon_F) + (\varepsilon_F - \varepsilon_k). \quad (9.3в)$$

Большинство физически интересных состояний — это простые элементарные возбуждения системы, содержащие по небольшому числу возбужденных частиц и дырок. Энергия каждого такого состояния есть просто сумма энергий отдельных частиц и дырок. Формально это можно выразить, вводя в рассмотрение операторы рождения дырок

$$b_k^\dagger = a_k \quad \text{при} \quad |k| \leq k_F. \quad (9.4a)$$

Соотношения (9.2б) и (9.2в), определяющие фермиевское основное состояние, теперь можно представить в следующем виде:

$$b_k |F\rangle = 0 \quad \text{при} \quad |k| \leq k_F, \quad (9.4б)$$

$$a_k |F\rangle = 0 \quad \text{при} \quad |k| > k_F. \quad (9.4в)$$

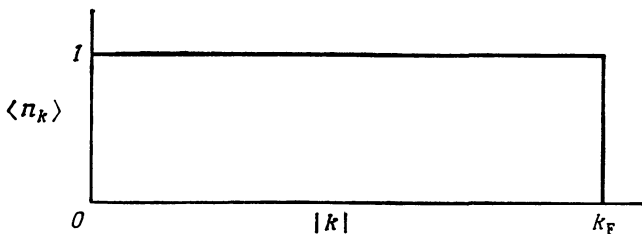
Набор операторов  $b_k^\dagger$  при  $|k| \leq k_F$  и операторов  $a_k^\dagger$  при  $|k| > k_F$  — наборы операторов, возбуждающих частицы и дырки. Эти операторы удобно рассматривать все вместе на равных основаниях. Обычно их называют операторами «квазичастичных» возбуждений; более точно, это операторы, которые рождают возбуждения, подобные частицам. Для набора квазичастичных операторов, как видно из соотношений (9.4б) и (9.4в), фермиевское основное состояние  $|F\rangle$  оказывается вакуумным состоянием.

Выраженный через указанные квазичастичные операторы рождения гамильтониан невзаимодействующего ферми-газа имеет следующий вид:

$$H = \sum_{k, |k| \leq k_F} (\varepsilon_F - \varepsilon_k) b_k^\dagger b_k + \sum_{k, |k| > k_F} (\varepsilon_k - \varepsilon_F) a_k^\dagger a_k, \quad (9.5)$$

причем здесь энергия основного состояния принимается равной нулю.

Энергетический спектр элементарных возбуждений образует непрерывный континуум для системы, заключенной в бесконечном объеме. При конечном объеме мы имеем очень тесно расположенные уровни дискретного спектра, причем расстояния между



Фиг. 9.1.

соседними уровнями тем меньше, чем больше объем системы. Особо отметим, что нет никакой «энергетической щели» между энергией основного состояния и энергиями первых самых низких элементарных возбуждений одной или двух частиц.

Фермиевское основное состояние — это собственное состояние всех операторов чисел частиц  $n_k$  с собственными значениями, равными 1 для  $k$ , лежащих внутри поверхности Ферми, и равными 0 для  $k$ , лежащих вне этой поверхности. Схематическое представление функции  $\langle n_k \rangle$  дано на фиг. 9.1.

В импульсном пространстве поверхность Ферми для невзаимодействующего ферми-газа оказывается сферой радиусом  $\hbar k_F$ . Для многочастичной системы, заключенной в конечный объем и удовлетворяющей на его границах периодическим граничным условиям, разрешенные значения импульсов отдельных частиц в импульсном пространстве лежат в узлах кубической решетки с такой величиной элементарной ячейки, что на одну частицу приходится объем, равный  $\hbar^3$ . Ниже мы будем рассматривать только фермионы, обладающие спином  $1/2$ ; это единственная физически интересная многофермионная система. Таким образом, у нас имеются по два фермионных места на каждом узле решетки, и поэтому плотность состояний одной частицы в расчете на единицу объема импульсного пространства равна

$$\{n_p d^3 p = \frac{2\Omega}{\hbar^3} d^3 p, \quad (9.6a)$$

где  $\Omega$  — объем пространства, занимаемого системой. Полное число состояний, расположенных внутри ферми-сферы радиусом  $\hbar k_F$ , равно

$$N = \frac{\Omega k_F^3}{3\pi^2} = \frac{\Omega (2m\varepsilon_F)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}, \quad (9.6b)$$

где  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми. Как видим, число частиц в ферми-сфере пропорционально объему ящика  $\Omega$ , в котором находится наша система, т. е. плотность в обычном, конфигурационном пространстве не зависит от размеров ящика.

### § 3. Невзаимодействующие фермионы в поле с медленно меняющимся потенциалом.

#### Приближение Тома — Ферми

Рассмотрим систему из невзаимодействующих друг с другом фермионов, находящуюся в поле с постоянным потенциалом  $V$ . Этот потенциал не оказывает никакого влияния на разрешенные значения импульсов, а влияет только на вид соотношения между энергией и импульсом для отдельной частицы. Число частиц, имеющих в единице объема с энергией ниже энергии Ферми, равно

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{N}{\Omega} = \frac{[2m(\varepsilon_F - V)]^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (9.7)$$

Позволим теперь потенциалу меняться от точки к точке в пространстве, но так, чтобы эти изменения были достаточно медленными и мы могли бы рассматривать «ящик» в каждой точке пространства, в окрестности которой, как мы полагаем, изменениями потенциала можно полностью пренебречь. Тогда можно будет использовать формулу (9.7), причем в ней  $V$  и  $\rho(\mathbf{r})$  будут функция-

ми положения. Фермиевское основное состояние мы построим теперь в точности так же, как выше, заполняя в каждой точке пространства низшие уровни до тех пор, пока у нас хватит частиц. Если мы представим себе нашу систему, составленную из большого числа ящиков, которые мы заполняем одновременно, то все эти ящики будут заполнены до одного и того же уровня. Таким образом, энергия  $\epsilon_F$  должна быть постоянной, не зависящей от положения точки в пространстве, и ее значение определяется только полным числом частиц. Указанные представления можно приложить, например, к электронному газу в твердом теле при наличии внешнего потенциала, который медленно изменяется на макроскопических расстояниях.

Это описание многофермионной системы, помещенной в поле с медленно изменяющимся внешним потенциалом, используется в приближении Томаса — Ферми в теории многоэлектронных атомов. Применим формулу (9.7) к системе электронов, двигающихся в некотором электростатическом потенциале. Если потенциал  $V$  известен, то (9.7) дает объемную плотность электронов. Если нет никаких других заряженных частиц в рассматриваемой области, то отсюда получаем сразу полную плотность электрического заряда в каждой точке пространства. Однако потенциал  $V$  не есть заранее заданная функция, так как он зависит от распределения плотности электронов в пространстве. Зависимость потенциала от плотности заряда выражается известным уравнением Пуассона

$$\nabla^2 V = -4\pi e^2 \rho. \quad (9.8)$$

Согласно этому классическому уравнению электростатики, мы можем определить потенциал  $V$ , если известна плотность заряда и если заданы определенные граничные условия. Квантовомеханическая формула (9.7) позволяет найти плотность электронов  $\rho$ , если потенциал  $V$  известен. Совместное рассмотрение уравнений (9.7) и (9.8) приводит к самосогласованному описанию режима движения электронов в таком потенциале, который включает в себя как исходный потенциал, так и потенциал, рождаемый самими электронами.

Для атома или атомного иона следует предполагать, что уравнения (9.7) и (9.8) справедливы во всем пространстве, за исключением начала координат, в котором помещен заряд ядра. Значение заряда ядра входит в задачу как граничное условие, налагаемое на поведение потенциала в начале координат. Еще одно граничное условие регламентирует поведение потенциала на больших расстояниях, а именно требуется, чтобы это был кулоновский потенциал, соответствующий заряду, помещенному в начало координат и равному полному заряду системы (заряд ядра минус заряд электронов). Для нейтрального атома полный заряд равен



нулю, а потому потенциал на бесконечных расстояниях должен убывать быстрее любого кулоновского потенциала.

Исключая из (9.7) и (9.8) плотность  $\rho$  и ограничиваясь случаем сферической симметрии, получаем

$$\frac{1}{r} \frac{d^2(rV)}{dr^2} = - \frac{4e^2 [2m(\epsilon_F - V)]^{3/2}}{3\pi\hbar^3}. \quad (9.9a)$$

Если имеется ядро с зарядом  $Z$ , помещенное в начале координат, то граничное условие принимает вид

$$rV = -Ze^2 \quad \text{при} \quad r = 0. \quad (9.9б)$$

Нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка (9.9a) можно представить в виде

$$r^2 \frac{d^2}{dr^2} \left[ \frac{r(\epsilon_F - V)}{Ze^2} \right] = \frac{4e^2}{3\pi\hbar^3} \left[ \frac{2mr(\epsilon_F - V)}{Ze^2} \right]^{3/2} r^{3/2} (Ze^2)^{1/2}, \quad (9.9в)$$

и поэтому удобно ввести в рассмотрение следующие переменные:

$$\Phi = \frac{r(\epsilon_F - V)}{Ze^2}, \quad (9.10a)$$

$$X = r \frac{Z^{1/3} e^2 m}{\hbar^2} \frac{2^{7/3}}{(3\pi)^{2/3}} = \frac{r}{a_0} \frac{Z^{1/3}}{0,885}, \quad (9.10б)$$

причем  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  — так называемый «боровский радиус» (радиус первой орбиты в атоме  $H$ ). В переменных (9.10a), (9.10б) уравнения (9.9в) и (9.9б) записываются совсем просто:

$$X^{1/2} \frac{d^2\Phi}{dX^2} = \Phi^{3/2}, \quad (9.11a)$$

$$\Phi(0) = 1. \quad (9.11б)$$

Как видим, в уравнение (9.11a) не входит  $Z$ . В случае нейтрального атома из граничного условия при  $X \rightarrow \infty$  получаем, что потенциал должен убывать на бесконечности быстрее  $1/X$  и не должен зависеть от  $Z$ . Таким образом, найденное однажды численное решение уравнения (9.11a) с граничным условием (9.11б) и только что сформулированным граничным условием оказывается общим решением, пригодным для любых нейтральных атомов. Мы получаем, таким образом, универсальную форму потенциала для всех атомов, в частности предсказываем, что размеры нейтрального атома пропорциональны  $Z^{1/3}$ .

Уравнение (9.11) действительно было решено численно, и это численное решение описано в литературе. Его можно использовать для приближенного описания свойств атомов, а также в качестве первого исходного приближения для других приближений, которые более точны, чем приближение Томаса — Ферми, скажем для приближения Хартри — Фока.

В приближении Томаса — Ферми пренебрегается двумя эффектами, которые могут оказаться существенными для многочастичной системы: 1) быстрыми изменениями потенциала; 2) корреляциями между электронами. Выше плотность электронов в каждой точке пространства мы предполагали в точности такой же, как для постоянного потенциала, величина которого равна величине исходного потенциала в этой точке. Отсутствие учета изменений потенциала может привести к ошибкам только тогда, когда потенциал заметным образом меняется на длине волны, соответствующей энергии на границе поверхности Ферми. Для атомов приближение Томаса — Ферми перестает быть пригодным поэтому как при малых, так и при больших расстояниях. При малых расстояниях потенциал становится сингулярным и изменяется очень быстро. На больших расстояниях потенциал почти равен фермиевской энергии, и длина волны становится очень большой. В промежуточной области, которая только и важна для многих задач в теории атомов, простое приближение Томаса — Ферми работает хорошо.

Предположение о том, что каждая частица движется в одном и том же электростатическом потенциале  $V(X)$ , означает, что мы пренебрегаем корреляциями между частицами. Истинное кулоновское взаимодействие между двумя электронами зависит от положений *обоих* электронов, и потенциал, который чувствует на себе отдельный электрон, изменяется, когда остальные электроны сдвигаются из своих мгновенных положений. Плотность электрического заряда в многоэлектронной системе не есть функция положения; она представляет собой динамическую переменную, которая является сложной функцией от динамических переменных всех электронов. Таким образом, уравнение Пуассона (9.8) надо считать операторным уравнением, а потенциал — многочастичным оператором, действующим на функции, зависящие от координат всех электронов. Составляя выражение для среднего значения этого потенциала, мы сводим исходную сложную многочастичную задачу к набору одночастичных задач, которые, конечно, можно легко разрешить, но при этом мы не учитываем эффектов корреляций в движениях электронов.

#### § 4. Приближение Хартри — Фока

Рассмотрим теперь приближение, улучшающее приближение Томаса — Ферми, в котором точно учитываются изменения потенциала, но все еще пренебрегается корреляциями. Вместо того чтобы использовать, как и в приближении Томаса — Ферми, конструкцию с ящиками в каждой точке пространства, теперь точно решается уравнение Шредингера для частицы, движущейся в потенциале  $V$ . Таким образом, вместо приближенной формулы

(9.7) мы получим совершенно точную формулу, которая позволит найти плотность электрического заряда, соответствующую заполнению  $N$  низкорасположенных уровней частицы в поле данного потенциала. Эту формулу можно затем скомбинировать с уравнением, подобным уравнению Пуассона (9.8), и найти потенциал, создаваемый данным распределением электронов. Так можно поступить в случае взаимодействия совершенно общего вида, например для нуклонных сил, причем для них мы не имеем, конечно, простой связи плотности частиц с создаваемым ими потенциалом. Самосогласованное решение указанных двух уравнений составляет суть приближения, которое называют «приближением Хартри — Фока» или «приближением самосогласованного поля».

Хартри-фоковское приближение лучше всего сформулировать в виде вариационного принципа. Пусть  $H$  — гамильтониан нашей многочастичной системы, а  $|\xi\rangle$  — пробная волновая функция. Согласно вариационному принципу, при любой вариации  $|\delta\xi\rangle$  мы должны потребовать, чтобы

$$\delta\langle H\rangle = \langle \xi + \delta\xi | H | \xi + \delta\xi \rangle - \langle \xi | H | \xi \rangle = 0, \quad (9.12a)$$

$$\langle \delta\xi | H | \xi \rangle + \langle \xi | H | \delta\xi \rangle + \langle \delta\xi | H | \delta\xi \rangle = 0; \quad (9.12b)$$

при этом последнее, третье слагаемое в (9.12b) надо отбросить, так как оно второго порядка малости по  $\delta\xi$ ; первое и второе слагаемые должны по отдельности равняться нулю, поскольку они представляют собой величины комплексно сопряженные по отношению друг к другу и варьируются независимо при произвольных вариациях  $|\delta\xi\rangle$ . Вариационный принцип, таким образом, приводит к требованию

$$\langle \delta\xi | H | \xi \rangle = 0 = \langle \xi | H | \delta\xi \rangle; \quad (9.13)$$

согласно этому требованию, состояние  $|H\xi\rangle$  должно быть ортогонально состоянию  $|\delta\xi\rangle$  при всех произвольных вариациях  $|\delta\xi\rangle$  с точностью до первого порядка по  $|\delta\xi\rangle$ .

Постараемся найти теперь наилучшую волновую функцию, которая по предположению имеет вид волновой функции системы невзаимодействующих друг с другом частиц, движущихся в данном внешнем потенциале. В формализме вторичного квантования такую волновую функцию можно получить, действуя просто произведением операторов рождения на вакуумное состояние, т. е.

$$|\xi\rangle = \prod_{i=1}^N a_{k_i}^\dagger |0\rangle, \quad (9.14)$$

причем здесь операторы рождения  $a_{k_i}^\dagger$  — это операторы рождения частиц в одночастичных состояниях некоторого базисного набора ортонормированных одночастичных состояний, соответствующих

некоторому неизвестному потенциалу, подлежащему определению. Волновая функция (9.14) описывает состояние, в котором каждое из  $N$  взятых одночастичных состояний занято одной частицей. Волновая функция самого общего вида дается линейной комбинацией всевозможных состояний (9.14). В приближении Хартри — Фока мы ограничиваемся только такими пробными волновыми функциями, которые можно записать в виде (9.14) при некотором выборе базиса одночастичных функций. В шредингеровском представлении любую волновую функцию можно записать в виде отдельного детерминанта (при этом она автоматически будет антисимметричной). Такую однодетерминантную волновую функцию называют «слэтеровским детерминантом». Для минимизации энергии в вариационном принципе варьируется форма базисных одночастичных функций, входящих в слэтеровский детерминант. Поскольку базис определяется эффективным внешним потенциалом, в котором движется отдельная частица, то варьирование формы базисных функций равносильно варьированию формы этого внешнего потенциала.

Будем варьировать теперь волновую функцию (9.14), бесконечно мало изменяя базис:

$$a_{k_i}^\dagger \rightarrow a_{k_i}^\dagger + \delta_i^\dagger, \quad (9.15a)$$

что дает

$$|\xi + \delta\xi\rangle = \prod_{i=1}^N (a_{k_i}^\dagger + \delta_i^\dagger) |0\rangle, \quad (9.15b)$$

причем  $\delta_i^\dagger$  — произвольный набор операторов рождения, умноженных на некоторую бесконечно малую постоянную.

Согласно (9.15b), вариация волновой функции первого порядка по  $|\delta\xi\rangle$  имеет вид

$$|\delta\xi\rangle = \sum_{j=1}^N (\pm \delta_j^\dagger \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^N a_{k_i}^\dagger |0\rangle); \quad (9.16)$$

знак  $+$  или  $-$  надо брать в зависимости от того, четно или нечетно число антикоммутирований, позволяющих операторы в произведении установить в таком порядке, как в (9.16); этот знак неважен для наших рассуждений.

Вариация (9.16) содержит только такие состояния, в которых все, кроме одного одночастичного состояния из первоначального набора  $k_i$ , заняты, причем это одно одночастичное состояние может измениться. Произвольная вариация включает в себя все возможные состояния нашей многочастичной системы, в которых по сравнению с исходным изменено значение только одного числа

заполнения одночастичного состояния, а все другие занятые состояния никак не меняются.

Подпространство варьируемых функций, таким образом, включает в себя все состояния, которые можно достичь при действии на данную пробную волновую функцию произвольными одночастичными операторами. Согласно же вариационному принципу (9.13), состояние  $|\eta\rangle$  должно быть ортогонально всем состояниям, которые можно получить при изменении состояния только одной какой-то частицы во взятой пробной волновой функции. Состояние  $|\eta\rangle$  должно поэтому быть линейной комбинацией, составленной из исходного состояния  $|\xi\rangle$  и состояний, получаемых из него возбуждением по меньшей мере двух частиц. Состояние  $|\xi\rangle$ , которое удовлетворяет требованию вариационного принципа, должно быть таким, что из него не должно получаться никаких одночастичных возбуждений, если на него подействовать гамильтонианом  $H$ . Наоборот, любое состояние, при действии на которое гамильтониан не производит одночастичных возбуждений, удовлетворяет вариационному принципу для подпространства пробных состояний вида (9.14).

Хартри-фоковский вариационный принцип можно формулировать также на языке частиц и дырок, или квазичастиц. Определим операторы рождения дырок для  $N$ -частичных состояний (9.14) таким образом, что

$$b_{k_i}^\dagger = a_{k_i}, \quad (9.17a)$$

и пусть  $a_m^\dagger$  — операторы рождения для одночастичных состояний, ортогональных состояниям нашего набора  $k_i$ , так что они дополняют эти последние состояния до некоторого полного набора одночастичных состояний. Тогда состояние (9.14) можно определить с помощью соотношений

$$b_{k_i} |\xi\rangle = 0 = a_m |\xi\rangle, \quad (9.17b)$$

где состояние  $|\xi\rangle$  — вакуумное состояние для нового набора операторов рождения  $a_m^\dagger$  и  $b_{k_i}^\dagger$ , которые рожают частичные и дырочные возбуждения. Назовем эти возбуждения квазичастичными, а состояние  $|\xi\rangle$  — вакуумным состоянием квазичастиц. Как видим, согласно хартри-фоковскому вариационному принципу, требуется, чтобы гамильтониан  $H$  при действии на состояние  $|\xi\rangle$  не рождал ни одного такого состояния, в котором были бы возбуждены только две квазичастицы (т. е. одна частично-дырочная пара). Состояние  $H |\xi\rangle$  содержит только само состояние  $|\xi\rangle$  и состояния, имеющие по меньшей мере по четыре возбужденных квазичастицы.

До сих пор мы ничего не говорили о «самосогласованном поле». Также мы ничего не сказали и о том, как находить хартри-фокковский базис одночастичных состояний на практике. Остановимся теперь на этих вопросах. Предположим, что наш гамильтониан есть сумма кинетической энергии частиц  $T$ , одночастичного потенциала  $W$  и двухчастичного взаимодействия  $V$ . В случае атома, например,  $W$  — центрально-симметричное поле ядра, а  $V$  — взаимодействие между электронами,

$$H = T + V = \sum_{hk'} \langle k' | T + W | k \rangle a_h^\dagger a_k + \\ + \frac{1}{2} \sum_{hh'k''k'''} \langle k'k'' | V | k''k \rangle a_h^\dagger a_{h'}^\dagger a_{k''} a_k. \quad (9.18)$$

Как мы показали выше, вариационный принцип требует, чтобы обращались в нуль все матричные элементы гамильтониана  $H$ , связанные с возбуждением только одной какой-нибудь частицы в состоянии (9.14), если только мы используем хартри-фокковский базис одночастичных состояний. Таким образом, все недиагональные матричные элементы одночастичного оператора  $T + W$  должны в точности сокращаться с матричными элементами потенциала, связанными с изменениями состояний только одной частицы. Отбирая в (9.18) все слагаемые, которые уничтожают частицу в одном из данных занятых состояний  $k_i$ , рождают частицу в другом произвольном состоянии  $k'$  и не меняют состояний всех остальных частиц, получим условие

$$\langle k' | T + W | k_i \rangle + \sum_{k_i''} \{ \langle k' k_i'' | V | k_i'' k_i \rangle - \langle k_i'' k' | V | k_i'' k_i \rangle \} = 0 \quad \text{при } k' \neq k_i; \quad (9.19)$$

здесь суммирование ведется по всем занятым состояниям  $k_i''$ . В условии (9.19) входит два матричных элемента двухчастичного потенциала, которые различаются только перестановкой частиц в конечном состоянии. Кроме того, при написании (9.19) мы учли дополнительный множитель 2, который возникает по той причине, что сумма в (9.18) берется по всевозможным значениям  $k, k', k'', k'''$  и каждый член, таким образом, входит в сумму дважды, так как мы можем одновременно переставить индексы обоих начальных и обоих конечных состояний. Двойной учет одинаковых членов в (9.18) больше не встречается в сумме (9.19), и мы должны учесть это обстоятельство, введя дополнительный множитель 2.

Определим теперь эффективный одночастичный потенциал, полагая

$$\langle k' | U | k_i \rangle = \sum_{k_i''} \{ \langle k' k_i'' | V | k_i'' k_i \rangle - \langle k_i'' k' | V | k_i'' k_i \rangle \}; \quad (9.20)$$

первая сумма в правой части (9.20) — просто «среднее поле», создаваемое частицами, так как это сумма двухчастичных матричных элементов, которые изменяют состояние одной какой-то частицы, причем суммирование проводится по всевозможным состояниям всех остальных частиц. Легко убедиться в том, что это действительно среднее поле, если переписать первую сумму в (9.20) в представлении Шредингера:

$$\sum_{k_i''} \langle k' k'' | V | k'' k_i \rangle = \sum_{k_i''} \int dx' \int dx'' \phi_{k_i'}^*(x') \phi_{k_i''}^*(x'') V \phi_{k_i''}(x'') \phi_{k_i}(x'). \quad (9.21a)$$

Если  $V$  зависит только от координат частиц  $x'$ ,  $x''$ , а не от импульсов частиц, то имеем

$$\sum_{k_i''} \langle k' k_i'' | V | k_i'' k_i \rangle = \int dx' \phi_{k_i'}^*(x') \left\{ \int V(x', x'') \rho(x'') dx'' \right\} \phi_{k_i}(x'),$$

где плотность вероятности найти частицу в точке  $x''$  определяется формулой

$$\rho(x'') = \sum_{k_i''} \phi_{k_i''}^*(x'') \phi_{k_i''}(x''). \quad (9.21b)$$

Как видим, в (9.21b) мы имеем матричный элемент для некоторого одночастичного потенциала, взятый для одночастичных состояний, причем этот одночастичный потенциал получается следующим образом. Мы берем наш исходный двухчастичный потенциал взаимодействия частицы в точке  $x'$  и частицы в другой точке  $x''$  и интегрируем его по всем возможным положениям частицы  $x''$  с весовым множителем, равным плотности вероятности обнаружить эту другую частицу в точке  $x''$ . Если потенциал  $V$  зависит от импульсов частиц, то потенциал  $U$  будет определяться не только плотностью вероятности, но также и плотностью тока вероятности.

Вторая сумма в (9.20) — «обменное взаимодействие». В представлении Шредингера его можно описать следующим образом. При возбуждении какая-то частица переходит из состояния  $k_i$  в состояние  $k'$ , а другая частица выходит из состояния  $k_i$  и заполняет дырку в состоянии  $k_i''$ , которая получилась при уходе из этого состояния первой частицы. При суммировании по  $k_i''$  в (9.20) надо учитывать также и состояние  $k_i$ , так как собственное поле частицы мы включили выше в среднее поле. Это слагаемое в сред-

нем поле в точности сокращается с соответствующим слагаемым в обменном взаимодействии, и мы не сделаем никакой ошибки, если включим члены с  $k'_i = k_i$  в суммы в (9.20).

Исходя из (9.19) и (9.20), определим одночастичный гамильтониан следующим образом:

$$\langle k' | h | k_i \rangle = \langle k' | T + W | k_i \rangle + \langle k' | U | k_i \rangle = \varepsilon_{k_i} \delta_{k' k_i}; \quad (9.22)$$

второе равенство мы написали, используя хартри-фоковское условие (9.19), согласно которому все недиагональные матричные элементы одночастичного гамильтониана  $h$ , взятые между занятым и незанятым состояниями, обращаются в нуль. Мы не имеем никакого условия в приближении Хартри — Фока, налагаемого на вид матричных элементов, берущихся между двумя занятыми состояниями, поскольку волновая функция (9.6) инвариантна относительно произвольного преобразования базисных функций, затрагивающего только функции занятых состояний. Будем выбирать, однако, наш базис так, чтобы оператор  $h$  был диагонален в подпространстве занятых состояний, причем диагональные матричные элементы обозначим посредством  $\varepsilon_{k_i}$ .

Соотношение (9.22) имеет вид одночастичного уравнения Шредингера для определения состояний  $|k_i\rangle$ , которые диагонализуют одночастичный гамильтониан  $h$ . Пока что в нашем рассуждении ничто не говорит нам о физическом смысле собственных значений  $\varepsilon_{k_i}$ , хотя существенно их интерпретировать как собственные энергии частицы, движущейся в среднем поле. Соотношения (9.20) и (9.22) иллюстрируют «самосогласованную» природу хартри-фоковского условия; они аналогичны соотношениям (9.7) и (9.8) для приближения Томаса — Ферми. В согласии с (9.22) требуется, чтобы одночастичные состояния  $|k_i\rangle$  были бы собственными состояниями одной частицы при ее движении в потенциале  $W + U$ . Подобно (9.7) и (9.22), можно рассчитать объемную плотность частиц, соответствующую заданному потенциалу; однако теперь это точный квантовомеханический результат. По формуле (9.20) мы можем рассчитать потенциал  $U$ , получаемый из двухчастичного потенциала  $V$  для  $N$ -частичной системы, частицы которой находятся в состояниях, определяемых из решения одночастичного уравнения (9.22). Это в точности эквивалентно использованию уравнения Пуассона (9.8) в случае кулоновского потенциала.

Энергия системы, получаемая в вариационном принципе, не равна сумме собственных энергий  $\varepsilon_{k_i}$ , найденных из (9.22) (которые имеют физический смысл одночастичных энергий). Эта энергия равна среднему значению гамильтониана (9.18) для много-



частичной волновой функции (9.14), т. е.

$$E = \sum_{k_i} \langle k_i | T + W | k_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{k_i k_i'} \{ \langle k_i k_i' | V | k_i' k_i \rangle - \langle k_i' k_i | V | k_i' k_i \rangle \}, \quad (9.23a)$$

$$E = \sum_{k_i} \langle k_i | T + W | k_i \rangle + \frac{1}{2} \langle k_i | U | k_i \rangle. \quad (9.23b)$$

Энергия  $E$  отличается от суммы собственных энергий уравнения (9.22) множителем  $1/2$  перед матричными элементами потенциала  $U$ . Происхождение этого множителя легко понять; он возникает из-за необходимости компенсации «двойного учета» двухчастичного потенциала, действующего между частицами  $a$  и  $b$ . Потенциал у нас появляется дважды: один раз в среднем поле, которое действует на частицу  $a$ , а другой раз в среднем поле, которое действует на частицу  $b$ . Сумма потенциальных энергий средних полей для всех частиц уже учтена в сумме собственных энергий уравнения (9.22), и поэтому вклад каждого двухчастичного взаимодействия учитывается дважды. Отметим, что мы, конечно, вовсе не использовали эти интуитивные соображения при выводе формулы (9.23б); просто мы с их помощью разъясняем окончательный результат, который строго был получен из вариационного принципа.

На практике уравнения (9.20) и (9.22) решают самосогласованно с помощью метода последовательных приближений. Сначала задают какой-нибудь пробный потенциал и используют его в уравнении (9.22) для отыскания одночастичных волновых функций. Затем эти функции используют в (9.20) и находят лучшее приближение для потенциала. Процесс затем повторяют снова и снова несколько раз, пока не будет достигнуто приближение с желаемой степенью точности. В качестве первого приближения часто используют потенциал Томаса — Ферми.

Приближение Хартри — Фока можно также использовать и для отыскания возбужденных состояний. Правда, в вариационном принципе требуется, чтобы для эффективного одночастичного потенциала, определенного в (9.20), производилось суммирование по состояниям  $k_i'$ , которые заняты для данного рассматриваемого возбужденного состояния. Потенциал, таким образом, будет разным для различных возбужденных состояний, как это и следовало ожидать, так как средний потенциал, который чувствует каждая данная частица, зависит от состояний других частиц. Конечно, очень неудобно иметь свой одночастичный базис для каждого состояния многочастичной системы. Если одночастичные состояния, расположенные выше поверхности Ферми, определяются для потенциала, который отличается от того, для которого были опре-

делены одночастичные состояния, расположенные внутри поверхности Ферми, то мы получаем два набора одночастичных состояний, которые не ортогональны друг другу.

При исследовании возбужденных состояний можно взять общий, «эффективный» потенциал для всех одночастичных состояний, определив его с помощью формулы (9.20), т. е. включив в сумму одни и те же состояния  $k_i$ , а именно те, которые заняты в основном состоянии многочастичной системы. Форму одночастичного гамильтониана (9.20) мы обобщим, включив в него все матричные элементы, берущиеся между всеми одночастичными состояниями, причем потребуем, чтобы гамильтониан был диагонален также и по состояниям, расположенным выше поверхности Ферми. Тогда уравнение (9.20) будет одночастичным уравнением Шредингера для определения полного набора одночастичных состояний в заданном внешнем потенциале. Этот потенциал определяется теперь только свойствами рассматриваемого основного состояния, и только волновая функция основного состояния нашей многочастичной системы будет удовлетворять требованиям вариационного принципа. Но если в нашей системе число частиц велико, то можно смело предположить, что потенциал не будет сильно меняться при возбуждении в основном состоянии небольшого числа частиц, и волновые функции состояний с небольшим числом возбужденных частиц все еще будут хорошо описываться нашим приближением.

Приближение Хартри — Фока широко используется в теории очень многих многочастичных систем. Когда приближение Хартри — Фока не может описать желаемые физические явления, его усовершенствуют и включают во взаимодействие члены, не учтенные в нем, а именно ту часть двухчастичного взаимодействия, которая ответственна за возбуждение пар частиц в основном состоянии. Эту часть двухчастичного взаимодействия иногда называют «остаточным взаимодействием» и ее обязательно учитывают по теории возмущений или более точными методами, когда теория возмущений отказывается служить. Об этом мы еще поговорим ниже.

Существующие приложения приближения Хартри — Фока можно разбить на две большие группы, для каждой из которых характерна своя симметрия. Во-первых, имеются сравнительно простые многочастичные системы, например атомы и атомные ядра, которые имеют центр, так что для них инвариантность относительно поворотов в пространстве и, следовательно, сферическая симметрия относительно центра играют важную роль. Во-вторых, имеются такие очень сложные многочастичные системы, например твердые тела или ядерная материя, которые практически бесконечны; в теории этих систем решающую роль играет трансляционная симметрия.

### § 5. Сферическая симметрия и оболочечная структура атомов и атомных ядер

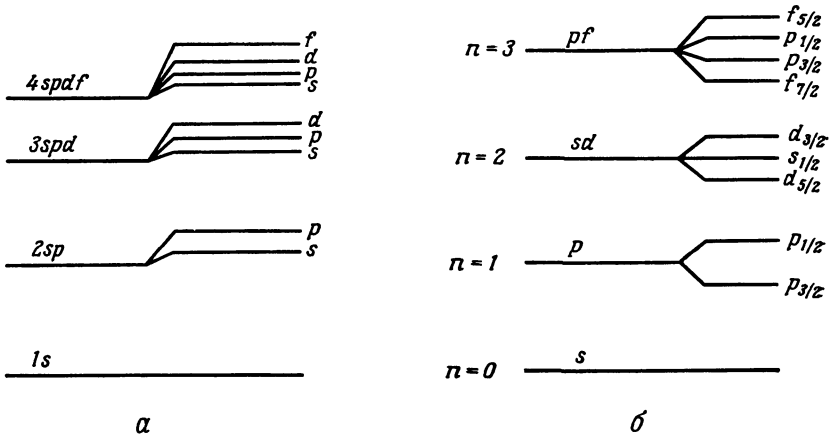
Двухчастичные взаимодействия в атомах и атомных ядрах инвариантны относительно поворотов в пространстве. Естественно потребовать поэтому, чтобы искомым хартри-фоковским потенциалом обладал сферической симметрией (исключительный случай деформированных ядер мы рассмотрим ниже). Энергетические уровни отдельной частицы в таком сферическом потенциале будем нумеровать квантовым числом момента количества движения  $j$ , причем уровень  $j$  должен быть  $(2j + 1)$ -кратно вырожденным. В атомах электростатическое взаимодействие между частицами не зависит от спина, и в очень хорошем приближении мы можем нумеровать одночастичные уровни квантовыми числами орбитального момента количества движения  $l$  и спинового момента  $s$ , причем уровень  $ls$  должен быть  $2(2l + 1)$ -кратно вырожден для электронов, спин которых  $s = 1/2$ .

При заполнении частицами этих дискретных вырожденных энергетических уровней образуются заполненные и незаполненные «оболочки» в атомах и ядрах. В общем случае мы будем иметь «остовные» частицы, которые полностью заполняют самые низкие энергетические уровни, и небольшое число «валентных» частиц, которые заполняют неполностью заполненные или незаполненные уровни. При этом многие свойства атомов и ядер можно понять, считая остов состоящим из заполненных оболочек и полностью инертным и ограничиваясь изучением только валентных частиц. Каждая заполненная оболочка имеет полный момент количества движения, равный нулю, причем все ее электрические и магнитные дипольные и прочие моменты тоже равны нулю. Таким образом, момент количества движения и электрические и магнитные моменты атома или ядра полностью определяются валентными частицами. Физически интересные элементарные возбуждения системы обычно тоже затрагивают только валентные частицы, хотя и имеются другие физически интересные возбуждения, при которых образуются дырки в заполненных оболочках.

Когда имеется несколько частиц в незаполненной оболочке, тогда в приближении Хартри — Фока получается очень высокое вырождение, так как эти частицы можно распределить многими способами по вырожденным состояниям рассматриваемой оболочки. Вырождение можно снять, если учесть остаточное взаимодействие по теории возмущений; для этого проводят диагонализацию остаточного взаимодействия в подпространстве линейных комбинаций состояний, вырожденных в приближении Хартри — Фока. Поскольку остаточное взаимодействие инвариантно относительно пространственных поворотов, линейные комбинации хартри-фоковских состояний, которые диагонализуют остаточное взаимодей-

ствие, будут собственными функциями полного момента количества движения. По этой причине алгебра момента количества движения и процедура связывания моментов широко используются в атомной и ядерной спектроскопии.

Остановимся теперь на некоторых качественных замечаниях о порядке следования уровней в атомных и ядерных спектрах. Соответственно для атомов и ядер хорошим отправным пунктом являются кулоновский потенциал и потенциал гармонического



Фиг. 9.2. Уровни энергии.

а — кулоновский потенциал или экранированный атомный потенциал; б — потенциал гармонического осциллятора или потенциал ядра.

осциллятора. Для обоих этих потенциалов известны точные решения. Порядок следования уровней для каждого из них показан на фиг. 9.2.

Различия в порядке следования уровней для обоих рассматриваемых потенциалов легко можно понять, если обратить внимание на различие их форм. Кулоновский потенциал очень сильно возрастает в начале координат, в то время как гармонический потенциал изменяется очень плавно в этой области. Это различие потенциалов больше всего будет чувствоваться в состоянии, волновые функции которых отличны от нуля в непосредственной окрестности начала координат. Если взять состояние с ненулевым орбитальным моментом количества движения  $l$ , то доминировать на малых расстояниях будет центробежный потенциал отталкивания  $l(l+1)/r^2$ , и поэтому волновая функция не сможет иметь больших значений в этой области. Следовательно, область сильного притяжения кулоновского потенциала около начала координат будут чувствовать больше всего уровни с малыми  $l$ .

Сравнивая на фиг. 9.2 уровни для кулоновского потенциала с уровнями для гармонического осцилляторного потенциала, мы видим, что возбужденные уровни с малыми значениями моментов количества движения, как правило, располагаются в случае кулоновского потенциала ниже, чем в случае гармонического осцилляторного потенциала. (Совершенно не так ведут себя уровни с большими моментами количества движения.) Основным состоянием в обоих случаях является  $s$ -состояние. Первые возбужденные уровни содержат  $p$ -состояния, вторые возбужденные уровни —  $d$ -состояния и т. д. Вообще *первый* уровень, который начинает содержать состояния с заданным значением  $l$ , является в случае обоих потенциалов  $l$ -м возбужденным уровнем. Второе  $s$ -состояние выроджено с первым  $p$ -состоянием в случае кулоновского потенциала и с первым  $d$ -состоянием в случае гармонического осцилляторного потенциала. Последующие состояния с малыми моментами количества движения сдвинуты вниз для кулоновского потенциала по отношению к их положениям для гармонического осцилляторного потенциала.

В многоэлектронных атомах хартри-фоковский потенциал довольно сильно отличается от чисто кулоновского потенциала атомного ядра, так как в этом потенциале учитывается также и самосогласованное поле, создаваемое отрицательно заряженными электронами. Хартри-фоковский потенциал, таким образом, слабее кулоновского потенциала, и его ослабление больше сказывается на больших расстояниях. Ослабление потенциала притяжения, таким образом, чувствуется сильнее состояниями, у которых имеются большие орбитальные моменты количества движения и волновые функции которых отличны от нуля именно в тех областях, где сказывается экранирование поля ядра полем электронов. Это приводит к тому, что первый возбужденный уровень для кулоновского потенциала расщепляется таким образом, что энергия  $p$ -состояния будет больше энергии  $s$ -состояния и т. д., как это легко видеть из фиг. 9.2, а. Для атомных ядер гармонический осцилляторный потенциал — это просто удобное первое приближение. Разумеется, следует ожидать, что форма хартри-фоковского потенциала в ядре для короткодействующих сил будет в каком-то грубом приближении повторять форму распределения плотности нуклонов в ядре, т. е. будет похожа на потенциал прямоугольной ямы. Хартри-фоковский потенциал должен быть, таким образом, более плавным в начале, чем осцилляторный гармонический потенциал, и более резко обрываться на некотором постоянном значении вместо того, чтобы уходить в бесконечность вверх, как это делает гармонический осцилляторный потенциал. Обе эти особенности хартри-фоковского потенциала вызывают уменьшение энергий состояний с большими моментами количества движения. Таким образом, порядок следования уровней

в реальных ядрах должен отличаться от того, который изображен на фиг. 9.2 для гармонического осцилляторного потенциала; уровни с высокими орбитальными моментами количества движения должны располагаться ниже. Так, например, для второго возбужденного уровня  $d$ -состояние передвигается в положение, расположенное ниже  $s$ -состояния этого уровня. Намного большее влияние на расположение уровней оказывает не рассмотренный нами сейчас эффект, а эффект «спин-орбитального» взаимодействия, которое расщепляет каждое состояние с заданным  $l$  на два состояния с полными моментами количества движения  $j = l + 1/2$  и  $j = l - 1/2$ . При этом состояние с большим  $j$  располагается ниже, что показано на фиг. 9.2, б.

Можно сделать также ряд полезных качественных заключений о порядке следования энергетических уровней, которые возникают при различных способах связывания моментов количества движения валентных частиц. В атомах «остаточное» взаимодействие не зависит от спина и в очень хорошем приближении можно считать, что оно носит характер отталкивания. Влияние спинов электронов на энергию уровней атома определяется целиком требованиями симметрии, налагаемыми на волновые функции принципом Паули. Принцип Паули запрещает электронам с параллельными спинами подходить на близкие расстояния друг к другу, а для электронов с антипараллельными спинами никаких таких ограничений нет. Таким образом, пространственная волновая функция, описывающая систему электронов с параллельными спинами, будет иметь меньшую энергию кулоновского отталкивания, чем пространственная волновая функция, описывающая систему электронов с антипараллельными спинами. Таким образом, для системы, составленной из нескольких электронов, состояние с максимальным спином должно обязательно лежать ниже всех других состояний, а состояния со все более и более малыми значениями спина должны располагаться все выше и выше. Этот эмпирически открытый факт для атомных спектров общеизвестен и называется «правилом Хунда».

Для ядер «остаточное» взаимодействие носит характер притяжения и является короткодействующим. Самой низкой энергией поэтому будет обладать состояние ядра с волновой функцией, в которой волновые функции нуклонов перекрываются насколько это возможно, т. е. все совсем наоборот, чем в случае атомов. В ядрах вследствие большой величины спин-орбитального взаимодействия отдельные одночастичные хартри-фоковские орбитали характеризуются полным моментом количества движения  $j$  и его проекцией  $m$  на ось  $z$ . Волновые функции двух нуклонов максимально перекрываются при связывании моментов обоих нуклонов в максимальный общий момент количества движения  $J = 2j$ . Для состояния с проекцией  $M = J$  каждый из обоих нуклонов будет

находиться в состоянии с проекцией  $m = j$ . Таким образом, оба нуклона будут заполнять одно и то же состояние, и поэтому мы имеем максимальное перекрытие их волновых функций. Но поскольку нуклоны — фермионы, то симметричное состояние  $J = 2j$  оказывается запрещенным, если оба нуклона являются нейтронами или протонами; оно разрешено, если один нуклон — нейтрон, а другой — протон. Если рассмотреть изоспин, то можно сказать, что состояние  $J = 2j$  разрешено для изоспина, равного нулю, и запрещено для изоспина, равного единице.

В системе тождественных нуклонов нельзя заставить два нуклона находиться в одном и том же состоянии. Но здесь надо учесть, что пары состояний с равными и противоположными значениями  $m$  (т. е. с проекциями  $m$  и  $-m$ ) имеют совпадающие пространственные распределения нуклонной плотности и различаются только фазовыми множителями при волновых функциях. Таким образом, для двух тождественных нуклонов двухчастичное состояние  $M = 0$  будет иметь меньшую энергию, чем состояния с другими значениями  $M$ . Используя это соображение для состояний, которые являются собственными и для  $M$ , и для  $J$ , заключаем, что состояние  $J = 0$  должно быть самым низким состоянием для системы из двух тождественных нуклонов.

Все эти качественные заключения хорошо подтверждаются экспериментальными значениями спинов основных состояний ядер с двумя валентными нуклонами и остовом заполненных оболочек. Когда оба валентных нуклона идентичны, тогда имеем  $J = 0$ ; когда один нуклон — протон, а другой — нейтрон, тогда имеем  $J = 2j$ . Когда в ядре имеется несколько идентичных валентных нуклонов, они будут стремиться объединиться в пары с  $J = 0$ , причем многочастичную волновую функцию ядра очень легко описать, используя теорию квантового числа сеньорити, которую на элементарном уровне мы обсудили в гл. 6 и более подробно будем еще обсуждать в гл. 10.

Когда в незаполненной оболочке ядра имеется несколько валентных нейтронов и протонов, возникает совсем новый эффект: ядро начинает деформироваться. Рассмотрим, например, как заполняется оболочка  $j = 7/2$ . Поместим в валентную оболочку сначала только два нуклона. Тогда самым низким для них будет нейтрон-протонное состояние с  $T = 0$  и  $J = 7$ . В состоянии  $M = 7$  обе частицы будут находиться в одном и том же одночастичном состоянии  $m = 7/2$ . Добавим теперь один нейтрон и один протон к этому состоянию. Если мы поместим их в одно и то же одночастичное состояние с определенным значением  $m$ , то самую низкую энергию сможем получить только тогда, когда поместим оба нуклона в состояние  $m = -7/2$ , так как соответствующая ему волновая функция имеет точно такое же распределение плотности нуклонов, как и волновая функция состояния, занятого первыми

двумя нуклонами с  $m = +7/2$ . Распределение суммарной нуклонной плотности для этих четырех нуклонов уже не будет сферически симметричным, а будет иметь форму сплюснутого (т. е. дискообразного) эллипсоида, так как именно этой симметрией обладает волновая функция с  $m = \pm j$ . Взаимодействие наших четырех валентных нуклонов с остальными нуклонами из остова замкнутых оболочек ядра ведет к образованию самосогласованного поля, которое не будет обладать сферической симметрией и которое будет стремиться деформировать остов ядра так, чтобы придать ему форму сплюснутого эллипсоида. Когда указанное взаимодействие достаточно велико, тогда остов действительно деформируется. В приближении Хартри — Фока все это проявляется в том, что у уравнений Хартри — Фока появляются решения с самосогласованным потенциалом и нуклонной плотностью, не имеющими сферической симметрии, но обладающими симметрией сплюснутого эллипсоида.

Мы можем добавить к остову ядра наши четыре нуклона, так что два нейтрона будут находиться в состоянии  $J = 0$  и два протона — в состоянии  $J = 0$ . При этом взаимодействие между тождественными нуклонами будет максимальным и будет сохранена сферическая симметрия ядра. Так мы построим многонуклонную волновую функцию ядра, являющуюся собственным состоянием квантового числа сеньорити. Таким образом, уравнения Хартри — Фока могут иметь как сферически-симметричные, так и деформированные решения, а это связано с тем, что как сферически-симметричное, так и деформированное состояния соответствуют локальным минимумам энергии, т. е. минимумам относительно бесконечно малых изменений многочастичной волновой функции. Является ли основное состояние многонуклонной системы ядра сферически-симметричным или деформированным, зависит целиком от энергий этих двух минимумов.

Качественно деформацию ядер часто описывают с помощью деформированного гармонического осцилляторного потенциала, т. е. такого потенциала, для которого силовые константы различны по направлению  $z$  и по направлениям  $x$  и  $y$ . Среднее значение энергии в основном состоянии в случае деформированного гармонического осцилляторного потенциала мы можем отложить на графике в зависимости от параметра деформации, который представляет собой разность значений силовых констант по различным направлениям. Так, мы построим кривую с минимумом сферически-симметричного основного состояния, который переходит в максимум, а затем во второй минимум; последний может быть расположен выше или ниже первого минимума. Когда второй максимум выше первого, тогда основное состояние ядра должно быть сферически-симметричным. Когда он ниже, тогда основное состояние будет деформированным. По существу здесь мы



имеем дело с грубо упрощенным вариантом хартри-фоковского вариационного принципа, потому что в осцилляторном гармоническом потенциале мы варьируем только силовые константы, а не всю форму потенциала. Если бы мы вариировали всю форму потенциала, т. е. использовали полный хартри-фоковский вариационный принцип, то качественно получили бы то же самое, но при этом, конечно, не смогли бы указать единственного параметра, характеризующего вариацию формы волновой функции.

Может создаться неверное представление, что наличие хартри-фоковского решения, не обладающего сферической симметрией, противоречит имеющейся симметрии гамильтониана относительно поворотов в пространстве. С одной стороны, деформированное хартри-фоковское решение, конечно, не является собственной функцией полного момента количества движения  $J$ . С другой стороны, мы знаем, что точные собственные функции гамильтониана должны быть собственными функциями  $J$ , если они только не вырождены. Конечно, очень легко понять, в чем здесь дело, и убедиться, что все это не противоречит требованиям сферической симметрии хартри-фоковских уравнений. Физика здесь состоит в следующем. Эллипсоидальное «дискообразное» решение хартри-фоковских уравнений возникло потому, что наше многоуклонное ядро действительно имеет равновесную форму сплюснутого эллипсоида. Сферическая же симметрия гамильтониана проявляется в том, что у нас нет в пространстве никакого выделенного направления, в котором могло бы ориентироваться наше эллипсоидальное дискообразное решение; волновая функция, описывающая основное состояние нашей многоуклонной системы, должна с равными вероятностями описывать все указанные ориентации. В приближении Хартри — Фока легко убедиться, что из существования *одного* какого-либо деформированного решения, определенным образом ориентированного в пространстве, вытекает существование бесконечного множества подобных ему решений, обладающих в точности такой же энергией (эти решения получаются при всевозможных поворотах в пространстве данного решения). Искомую многоуклонную волновую функцию, описывающую с равными вероятностями все пространственные ориентации, можно построить, взяв линейную комбинацию всех вышеуказанных состояний, т. е. составив интеграл по углам, характеризующим повороты в пространстве.

### § 6. Трансляционная симметрия в теории твердого тела и в теории ядерной материи

Многочастичные системы, состоящие из огромного числа частиц, можно рассматривать или в бесконечном пространстве, или как заключенные в очень большой «ящик» с наложенными на его гра-

ницах периодическими условиями. Когда межчастичные взаимодействия зависят только от расстояний между частицами и еще, возможно, от импульсов частиц, но не зависят от абсолютных положений отдельных частиц в пространстве, гамильтониан многочастичной системы будет инвариантным относительно пространственных трансляций, а полный импульс этой многочастичной системы будет сохраняться. При этих условиях базис из плоских волн, получаемый для невзаимодействующего ферми-газа, будет давать точное решение уравнений Хартри — Фока, составленных для нашей взаимодействующей многочастичной системы. В этом легко убедиться, проводя следующее рассуждение.

Возьмем основное состояние невзаимодействующего ферми-газа, в котором все одночастичные состояния, расположенные внутри поверхности Ферми, заполнены, а все, расположенные выше, — не заняты. Это основное состояние будет точным решением уравнений Хартри — Фока для системы взаимодействующих фермионов, если ее гамильтониан взаимодействия при действии на это состояние не может перевести его ни в одно из состояний с одной возбужденной частично-дырочной парой, а переводит его только в состояния с двумя частицами и двумя дырками. В возбуждении с одной частично-дырочной парой одну частицу мы вынимаем из одночастичного состояния, расположенного внутри поверхности Ферми, и переводим ее в одночастичное состояние, расположенное выше этой поверхности, причем импульс этого второго одночастичного состояния не равен импульсу исходного. Таким образом, возбуждение одной частично-дырочной пары обязательно изменяет импульс основного состояния. Для любого гамильтониана, который сохраняет импульс, от нуля отличны только такие матричные элементы, которые берутся между состояниями с одинаковыми импульсами, и поэтому он не может иметь матричных элементов, связывающих основное состояние с состояниями с одной возбужденной частично-дырочной парой. Следовательно, фермиевское основное состояние будет решением уравнений Хартри — Фока вообще для любого трансляционно инвариантного гамильтониана, т. е. для любого взаимодействия, сохраняющего импульс.

По указанной причине базис из плоских волн широко используется в задачах теории твердого тела и в теории ядерной материи. При исследовании движения электронов в твердом теле, однако, нужно учитывать структуру кристаллической решетки, нарушающую совершенную трансляционную инвариантность. Когда влиянием кристаллической решетки можно пренебречь, например в задачах, относящихся к электронному газу, который движется в пространственно однородном распределении положительного электрического заряда (этим распределением мы приближенно заменяем кристаллическую решетку ионов), мы,

разумеется, можем использовать базис из плоских волн. Когда же мы должны обязательно рассматривать кристаллическую решетку, тогда у нас останется только инвариантность относительно дискретных пространственных трансляций на векторы решетки, и решением уравнений Хартри — Фока будут блоховские волны, причем хартри-фоковский самосогласованный потенциал окажется пространственно периодической функцией.

Заметим, что задачу о движении ионов твердого тела также можно рассмотреть как задачу проблемы многих частиц, взаимодействующих друг с другом посредством трансляционно инвариантных ионных сил, т. е. сил, зависящих только от межионных расстояний. Здесь мы имеем в точности такую же ситуацию, как для деформированных атомных ядер. Хотя базис из плоских волн и дает точное решение хартри-фоковских уравнений, существует и другое решение с меньшей энергией (частицы совершают при этом малые колебания около узлов определенной кристаллической решетки). Описывающая такое движение волновая функция не будет собственной функцией полного импульса, однако мы можем построить собственную функцию импульса, если возьмем линейную комбинацию, составленную из волновых функций для решеток с узлами, расположенными во всевозможных сдвинутых положениях в разных точках пространства. Этого, правда, никогда не делают, так как такая волновая функция не представляет физического интереса.

Другой пример огромной многочастичной системы, физически очень интересной, дает «спиновая система». Во многих твердых телах спины атомных ядер, ионов в узлах решетки, и некоторых электронов можно рассматривать как добавочные степени свободы системы, которые в очень хорошем приближении отделяются от всех других ее степеней свободы. Например, мы можем построить простую модель ферромагнетика, если предположим, что каждый электрон локализован в узле некоторой кристаллической решетки и что имеется спин-спиновое взаимодействие. В этой модели динамическими переменными являются ориентации в пространстве спинов электронов, закрепленных в узлах решетки. Гамильтониан модели представляет собой сумму двух слагаемых: описывающего взаимодействие каждого спина с внешним магнитным полем и описывающего спин-спиновое взаимодействие. Оказывается, что это очень хорошая модель, хотя мы и не рассматриваем в ней никаких других степеней свободы электронов, т. е. пространственных степеней свободы электронов, а также движение всех других частиц, находящихся в узлах кристаллической решетки.

В теории этой модельной системы можно с успехом использовать приближение Хартри — Фока; иначе говоря, можно считать, что каждый спин находится в поле, являющемся суммой

внешнего магнитного поля и некоторого «среднего поля», возникающего от взаимодействия данного спина со всеми остальными спинами.

**§ 7. Более точное, чем хартри-фоковское, приближение. Остаточное взаимодействие и корреляции**

Приближение Хартри — Фока можно улучшить, если учесть так называемое «остаточное» взаимодействие. Если хартри-фоковская волновая функция дает хорошее нулевое приближение, то можно надеяться, что эффекты остаточного взаимодействия будут малы и поэтому их можно обработать с помощью теории возмущений. Имеются, к сожалению, случаи, когда теорию возмущений к остаточному взаимодействию применить все же нельзя. Хартри-фоковская волновая функция в этих случаях не дает хорошее нулевое приближение для построения теории возмущений, хотя в других отношениях она является очень хорошей приближенной функцией и ее можно с успехом использовать для предсказания точных значений многих физических величин. Здесь мы можем указать два следующих примера.

*Первый пример.* Хартри-фоковская волновая функция оказывается недостаточно хорошей, когда мы имеем дело с атомами и атомными ядрами, находящимися в состояниях с несколькими валентными частицами во внешней оболочке. Как мы уже говорили выше, при этом нужно использовать теорию возмущений «в случае вырождения» и диагонализировать взаимодействие в подпространстве линейных комбинаций состояний, которые вырождены в хартри-фоковском приближении. Если мы поместим теперь наш атом или ядро в слабое магнитное поле, которое снимает вырождение хартри-фоковских состояний, то, чтобы получить хорошие приближенные волновые функции, нам надо будет диагонализировать как остаточное взаимодействие, так и взаимодействие с внешним магнитным полем в подпространстве состояний, вырожденных при отсутствии магнитного поля.

*Второй пример.* В теории твердого тела хартри-фоковское основное состояние не вырождено, но в хартри-фоковском приближении имеется большое количество вырожденных состояний, которые очень близки по энергии к основному состоянию и которые перемешиваются с основным состоянием посредством остаточного взаимодействия. При этом последнее нельзя считать просто возмущением для исходного невырожденного хартри-фоковского основного состояния; требуется использовать процедуру диагонализации в подпространстве «почти вырожденных» хартри-фоковских состояний. Получающаяся многочастичная волновая

функция будет сильно отличаться от исходной волновой функции хартри-фоковского основного состояния и практически не будет с ней перекрываться. Тем не менее из-за того, что эти две функции различаются только частицами, заполняющими состояния, расположенные в непосредственной окрестности поверхности Ферми, не будет заметного различия в значениях чисел заполнения, вычисленных для них (см. фиг. 9.1). Правда, вместо резкого скачка функции  $\langle n_k \rangle$  на поверхности Ферми будет сравнительно плавный переход от единицы до нуля на небольшом участке вблизи той точки, где ранее происходил скачок. Фермиевская волновая функция, следовательно, будет давать хорошее приближение для всех тех свойств многочастичной системы, которые не чувствительны к точной структуре поверхности Ферми, хотя она и является очень плохой исходной функцией для построения теории возмущений.

Приведенный выше пример показывает, что фермиевское основное состояние может быть нестабильно относительно возмущений, вызванных остаточным взаимодействием, когда уровни системы очень тесно расположены и есть небольшая область импульсного пространства, в которой энергия возбуждения меньше по величине матричных элементов остаточного взаимодействия. Вследствие наличия огромного числа состояний такого типа (в макроскопической многочастичной системе) не нужно даже и пытаться диагонализировать остаточное взаимодействие в каком-то специально построенном подпространстве, как это можно и нужно сделать в теории атомов и ядер с незаполненными оболочками. Вместо этого надо искать особые приближенные методы для исследования таких интересных случаев. О некоторых из них мы расскажем в гл. 10 и 11.

Во втором приведенном примере теорию возмущений нельзя применять к остаточному взаимодействию, хотя оно и слабое, из-за квазивозрождения состояний на поверхности Ферми. Имеются, конечно, также и другие примеры многочастичных систем, для которых теория возмущений не применима (в частности, она не применима, когда остаточное взаимодействие сильное, но только в определенной области, так что в основном хартри-фоковская картина движения частиц в многочастичной системе сохраняется). Самый характерный пример такой многочастичной системы мы имеем в теории ядерной материи и в теории конечных ядер, в которых необходимо учитывать отталкивательную «сердцевину» в нуклон-нуклонном взаимодействии. Рассмотрим, например, ядерную материю с двухнуклонным взаимодействием, которое имеет отталкивательную сердцевину, т. е. такой потенциал взаимодействия двух частиц, который становится бесконечным на расстояниях, меньших некоторого характерного расстояния; другими словами, рассмотрим систему, частицы которой можно представ-

лять в виде непроницаемых шариков конечного радиуса, окруженных потенциалами притяжения. Для такой системы взаимодействия сохраняет импульс, и базис из плоских волн будет точным решением уравнений Хартри — Фока. Однако всякая попытка вычислить хотя бы энергию основного состояния в приближении Хартри — Фока оказывается совершенно несостоятельной. Так как потенциал становится бесконечным в конечной, хотя и малой области пространства в окрестности каждой частицы, матричные элементы двухчастичного потенциала, взятые между состояниями плоских волн, оказываются бесконечными, и мы ничего с этим не можем поделать. Можно, правда, сказать и так: сильный потенциал отталкивания на малых расстояниях на самом деле не бесконечный, а принимает некоторые очень большие конечные значения. Тогда мы можем, несомненно, получить конечные значения матричных элементов, но они будут до смешного огромны, т. е. не будут иметь никакого физического смысла.

Чтобы по-настоящему исследовать взаимодействие частиц с бесконечными отталкивательными «сердцевинами», надо воспользоваться следующим соображением, заимствованным из квантовой двухчастичной задачи рассеяния друг на друге твердых шаров. В ней наличие отталкивательных сердцевин у частиц не доставляет никаких неприятностей, так как решения соответствующего двухчастичного уравнения Шредингера обращаются строго в нуль, если расстояние между двумя частицами оказывается меньше удвоенного радиуса сердцевин. Поэтому сердцевина с бесконечным потенциалом не приводит ни к каким бесконечным энергиям; иначе говоря, область пространства с бесконечным потенциалом исключается из рассмотрения, так как частицы не могут подходить друг к другу на очень малые расстояния. Можно было бы подумать, что в этой задаче хартри-фоковская волновая функция, составленная из плоских волн, все еще является хорошим приближением к точной волновой функции, поскольку никогда обе частицы не бывают расположены так близко друг от друга, чтобы отталкивательная сердцевина во взаимодействии, действительно проявилась. Но это не так. Хартри-фоковскую волновую функцию нужно обязательно изменить, подействовав на нее проекционным оператором, который автоматически обращал бы ее в нуль в тех случаях, когда какие-либо две частицы подходят на расстояние, меньшее удвоенного радиуса сердцевин. Этот проекционный оператор, конечно, по необходимости будет сингулярным двухчастичным оператором; следовательно, работать с ним очень трудно.

Плодотворный подход к проблеме ядерной материи, позволяющий учитывать наличие у нуклонов отталкивательных сердцевин, разработал Бракнер. Он воспользовался формализмом  $T$ -матрицы (из теории рассеяния) и в частности использовал то, что  $T$ -матрица при действии на невозмущенную волновую функцию двухча-

стичной системы дает в точности тот же результат, который можно получить, умножая точную волновую функцию на потенциал, т. е.

$$T\phi = V\psi, \quad (9.24)$$

где  $V$  — потенциал двухчастичного взаимодействия;  $\phi$  — невозмущенная функция двухчастичной системы, составленная из плоских волн;  $\psi$  — точное решение двухчастичной задачи рассеяния. Если мы рассмотрим равенство (9.24) в конфигурационном пространстве, то сразу увидим, что на малых расстояниях между двумя частицами, где потенциал  $V$  бесконечен, точная волновая функция  $\psi$  должна обращаться в нуль, а произведение  $V\psi$  будет оставаться конечным. Кроме того, так как невозмущенная волновая функция  $\phi$  нигде не обращается в нуль, оператор  $T$  должен быть регулярным во всем пространстве.

Основным моментом в теории ядерной материи Бракнера является процедура построения точного решения двухчастичной задачи рассеяния и соответствующей  $T$ -матрицы. После этого проблема многих частиц переформулируется таким образом, что в ней используется невозмущенная хартри-фоковская волновая функция, а сингулярное двухчастичное взаимодействие  $V$  заменяется «эффективным двухчастичным взаимодействием»  $T$ . Таким образом, в теории Бракнера учет сильных корреляционных эффектов между частицами достигается не путем построения улучшенной волновой функции, а путем применения вместо «остаточного» взаимодействия другого, «эффективного» взаимодействия, которое, согласно (9.24), приводит к тем же результатам (при использовании невозмущенных волновых функций), что и настоящее, реальное взаимодействие (при использовании точных волновых функций).

Применение изложенных соображений в теории ядерной материи Бракнера на практике сталкивается, однако, с очень большими трудностями. Во-первых, двухчастичная задача рассеяния в теории Бракнера — это не просто задача рассеяния для двух свободных частиц. Даже если пренебречь полностью взаимодействием двух рассматриваемых частиц с остальными частицами в нашей системе, то все равно мы не сможем выключить принцип Паули, который запрещает двум частицам рассеиваться в состоянии, уже занятые другими частицами. Поэтому надо решать двухчастичную задачу рассеяния, осложненную наличием ферми-распределения оставшихся невзаимодействующих частиц, т. е., как говорят, нужно решать «уравнение Бете — Голдстоуна». Ввести строгим образом двухчастичную  $T$ -матрицу в квантовую многочастичную проблему тоже очень сложно. Впрочем, все это уже давно сделано, к тому же вполне удовлетворительно, так что можно даже в рамках разработанного формализма рассматри-

вать поправки очень высоких порядков. Все это составляет содержание «теории ядерной материи Бракнера», подробное рассмотрение которой выходит за рамки данной книги. Подчеркнем, что здесь мы хотели только разъяснить читателю, в чем состоит физическая суть теории Бракнера.

### Задачи

1. Рассмотрите многочастичную систему, состоящую из многих фермионов массы  $m$ , движущихся в одномерном гармоническом осцилляторном потенциале  $V = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ . Рассмотрите основное состояние этой  $N$ -частичной системы и рассчитайте энергию Ферми (энергию самого высокого заполненного уровня). При этом используйте точную волновую функцию гармонического осциллятора и приближение Томаса — Ферми, согласно которому плотность частиц, находящихся в точке  $x$ , такая же, как для «ящика» с постоянным потенциалом  $V(x)$ .

2. Обозначьте через  $|\text{HF}\rangle$  решение хартри-фоковских уравнений для многофермионной системы с гамильтонианом  $H$ . Какой из нижеприводимых матричных элементов обращается в нуль

$$\begin{aligned} &\langle \text{HF} | a_k^\dagger H a_m^\dagger | \text{HF} \rangle, \\ &\langle \text{HF} | a_k^\dagger a_m H | \text{HF} \rangle, \\ &\langle \text{HF} | a_m a_k^\dagger H | \text{HF} \rangle, \\ &\langle \text{HF} | a_k H a_m^\dagger | \text{HF} \rangle, \\ &\langle \text{HF} | H | \text{HF} \rangle? \end{aligned}$$

3. При каком двухчастичном взаимодействии набор плоских волн будет автоматически решением уравнений Хартри — Фока? На чем основывается ваш ответ?

4. Рассмотрите упрощенную модель ферромагнетика, в которой  $N$  спинов  $1/2$  взаимодействуют друг с другом и с внешним магнитным полем и гамильтониан которой имеет вид

$$H = -g \sum_{i=1}^N h_i \sigma_{zi} - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \sum_{j=1}^N G_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j,$$

где  $h_i$  — напряженность внешнего магнитного поля (направленного по оси  $z$ ) в месте расположения спина  $i$ ;  $\sigma_i$  — спиновые матрицы Паули, описывающие ориентацию спина  $i$ ;  $G_{ij}$  — параметр, характеризующий силу связи между спином  $i$  и спином  $j$ .



а) Обозначьте через  $a_{i+}^\dagger$  и  $a_{i-}^\dagger$  операторы рождения в узле  $i$  спинов в состояниях с проекциями  $S_z = +1/2$  или  $-1/2$  соответственно и выразите гамильтониан через эти вторично квантованные операторы.

б) Выпишите в явном виде пробную волновую функцию наиболее общего вида для указанной задачи в приближении Хартри — Фока (т. е. в предположении, что каждый спин ориентируется независимо в среднем поле, создаваемом другими спинами). Используйте вторично квантованные операторы из п. «а».

в) Выпишите в явном виде хартри-фоковские уравнения для данной задачи.

г) Покажите, что  $z$ -составляющая полного момента количества движения

$$S_z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_{zi}$$

коммутирует с гамильтонианом  $H$  при  $\hbar_i = \hbar$ , т. е. при  $\hbar_i$ , не зависящем от  $i$  (однородное магнитное поле).

д) Покажите, что хартри-фоковский вариационный принцип можно изменить так, что с его помощью можно будет получать приближенные решения уравнения Шредингера для состояний, которые будут одновременными собственными функциями операторов  $H$  и  $S_z$ , соответствующими данному собственному значению  $S_0$  оператора  $S_z$ . Используйте метод множителей Лагранжа в вариационном принципе.

## Глава 10. ПАРНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ И ТЕОРИЯ БКШ

### § 1. Введение

В гл. 6 мы уже рассмотрели многофермионную систему с особым видом взаимодействия, которое приводит к образованию коррелированных, или связанных, пар. Основное состояние такой системы построено целиком из коррелированных пар, причем каждая пара обладает одним и тем же фиксированным полным импульсом. Чтобы разрушить какую-нибудь пару или же просто перевести ее в состояние с немного отличающимся импульсом, требуется конечная энергия из-за влияния принципа Паули. Энергетическая щель характерна для сверхпроводника или сверхтекучих систем, и ее нет у так называемых нормальных систем, например у невзаимодействующего ферми-газа. В нормальных системах существуют возбужденные состояния с очень малой или даже бесконечно малой энергией возбуждения; эти состояния отличаются от основного тем, что имеют одну или две возбужденные частицы, расположенные на поверхности сферы Ферми.

В упрощенной модели, рассмотренной в гл. 6, мы полностью пренебрегли кинетической энергией отдельных фермионов и взаимодействие взяли в столь простой форме (6.21), что получаемые связанные пары имели прямоугольный импульсный спектр, показанный на фиг. 6.1, б. Эти упрощения позволили нам в гл. 6 легко построить точное решение задачи, используя квазиспиновые операторы. Конечно, мы сможем теперь развить более реалистичную теорию, если будем исходить из гамильтониана, в который включены кинетические энергии фермионов и который описывает взаимодействие более общего вида:

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - \sum_{kk'} G_{kk'} a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k'\downarrow}^\dagger a_{-k\downarrow} a_{k'\uparrow}. \quad (10.1)$$

Здесь  $\varepsilon_k$  — кинетическая энергия фермиона в состоянии с волновым вектором  $k$ ;  $G_{kk'}$  — некоторая функция, характеризующая силу взаимодействия [ $G_{kk'}$  — теперь функция импульсов  $k$  и  $k'$ , а не постоянная, как в (6.21)]. Взаимодействие в гамильтониане (10.1) стремится объединить частицы в такие пары, находящиеся в связанных состояниях, которые имеют более общую, а не просто прямоугольную форму импульсного распределения. Для удобства

в (10.1) мы взяли взаимодействие, связывающее частицы в пары, находящиеся в состояниях с нулевым полным импульсом, а не с импульсом, равным заданному значению  $2\hbar\mathbf{k}$ , как в (6.21). Гамильтониан (10.1), называемый «редуцированным гамильтонианом БКШ», впервые был предложен в знаменитой работе Бардина, Купера и Шриффера по теории сверхпроводимости.

К сожалению, задачу с гамильтонианом БКШ нельзя решить точно с помощью техники квазиспиновых операторов, как это удалось сделать для гамильтониана из гл. 6. Однако можно найти хорошее приближенное решение, используя математические приемы, развитые Бардином, Купером, Шриффером, а также Боголюбовым и Валатином<sup>1)</sup>. Более того, было показано, что это приближенное решение становится точным в пределе бесконечно большого объема и качественно обладает такими же свойствами, как точное решение для гамильтониана из гл. 6.

## § 2. Упрощенная модельная задача БКШ в пределе сильной связи

Прежде чем заниматься приближенным решением БКШ, рассмотрим упрощенный вариант их теории. Предположим, что  $G_{kk'}$  имеет постоянное значение в некоторой области в окрестности  $k_F$  и строго равно нулю вне этой области. Пренебрежем далее всеми изменениями кинетической энергии  $\epsilon_k$  в области взаимодействия и заменим  $\epsilon_k$  на некоторое среднее значение  $\epsilon_F$ :

$$G_{kk'} = G \quad \text{при} \quad k_F - \Delta k \leq |\mathbf{k}| \leq k_F + \Delta k, \quad (10.2a)$$

$$G_{kk'} = 0 \quad \text{при} \quad ||\mathbf{k}| - k_F| > \Delta k, \quad (10.2b)$$

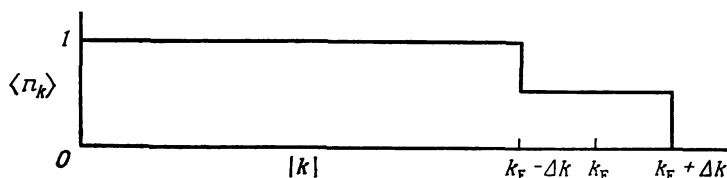
$$\epsilon_k = \epsilon_F \quad \text{при} \quad k_F - \Delta k \leq |\mathbf{k}| \leq k_F + \Delta k. \quad (10.2в)$$

Полученную упрощенную задачу можно легко разрешить с помощью техники квазиспиновых операторов, описанной в гл. 6. Ниже  $k_F - \Delta k$  взаимодействия нет, и все однофермионные уровни заняты, как в случае невзаимодействующего ферми-газа. Выше  $k_F + \Delta k$  также нет взаимодействия, и все однофермионные уровни незаняты, так же, как и в случае невзаимодействующего ферми-газа. В области вблизи  $k_F$  взаимодействие постоянное и изменениями кинетической энергии фермионов можно пренебречь. Таким образом, наша задача в точности оказывается задачей для модельного гамильтониана (6.21) и ее можно разрешить точно, используя технику квазиспиновых операторов, которые теперь следует определить, однако, по-другому: только для рассматриваемой области значений  $k$  в окрестности  $k_F$ . В получаемом решении все однофермионные уровни в области с отличным от нуля

<sup>1)</sup> См. примечание редактора на стр. 151.— *Прим. ред.*

взаимодействием будут заняты одинаково; найденное распределение показано на фиг. 10.1.

Теперь у нас имеются коррелированные, или связанные, пары фермионов, занимающих состояния с равными и противоположными импульсами вблизи границы ферми-распределения. Используя результаты гл. 6, энергию основного состояния и энергию возбуждения простого возбужденного состояния можно вычислить



Фиг. 10.1.

для этой модели, непосредственно взяв формулу (6.35) для энергии взаимодействия:

$$V |m, v\rangle = -mG\Omega \left\{ 1 - \frac{(m-1+v)}{\Omega} \right\} |m, v\rangle.$$

В случаях, представляющих практический интерес, ширина области взаимодействия в импульсном пространстве мала по сравнению с импульсом Ферми, а плотность однофермионных состояний в этой области в очень хорошем приближении можно считать постоянной. Число взаимодействующих состояний, расположенных выше  $k_F$ , в точности равно числу состояний, расположенных ниже  $k_F$ . Полное число состояний  $\Omega$  для частиц с заданным спином, имеющих в области взаимодействия, равно поэтому удвоенному числу состояний, которые полностью заняты частицами невзаимодействующего ферми-газа в этой области. Следовательно, число фермионных частиц в области взаимодействия в точности равно  $\Omega$ , т. е. половине того числа, которое нужно для полного заполнения всех однофермионных состояний в области взаимодействия.

Как непосредственно видно из (6.35), в основном состоянии все частицы, находящиеся в области взаимодействия, спарены, (т. е. нет никаких неспаренных частиц), так что  $m = 1/2\Omega$ ,  $v = 0$ . Энергия взаимодействия фермионов в этом состоянии равна

$$V_g = \frac{-G\Omega^2}{4} \left\{ 1 + \frac{2}{\Omega} \right\}. \quad (10.3a)$$

Для возбужденного состояния, для которого  $m = \frac{1}{2}\Omega - \delta$ ,  $v = v$ , энергия возбуждения равна

$$V(\delta, v) - V_g = G\Omega \left\{ \frac{v}{2} + \frac{(\delta + 1 - v)}{\Omega} \right\}. \quad (10.36)$$

Кинетическая энергия нашей системы в основном состоянии в точности равна энергии невзаимодействующего ферми-газа для рассматриваемой нами сейчас простой модели, в которой пренебрегают изменениями кинетической энергии фермионов в области взаимодействия. Таким образом, взяв в качестве нуля отсчета энергию невзаимодействующего ферми-газа, получим, что вся энергия основного состояния определяется формулой (10.3а).

Рассмотрим теперь для нашего гамильтониана энергии простейших возбужденных состояний, аналогичных тем возбужденным состояниям невзаимодействующего ферми-газа, в которых возбуждена одна частица. Существует несколько типов таких возбужденных состояний:

а. Разрушается одна пара, и обе получающиеся частицы остаются в области взаимодействия. Кинетическая энергия системы при этом остается такой же, как в основном состоянии. Энергия возбуждения, следовательно, будет определяться просто формулой (10.36), в которой только надо положить  $\delta = 1$ ,  $v = 2$ .

б. Разрушается одна пара, но только одна из полученных частиц остается в области взаимодействия, а другая попадает в состояние  $k$ , лежащее вне этой области. Вклад энергии взаимодействия в энергию возбуждения системы будет даваться формулой (10.36), в которой надо положить  $\delta = 1$ ,  $v = 1$ . Кинетическая энергия теперь увеличится по сравнению с кинетической энергией основного состояния на величину  $\epsilon_k - \epsilon_F$ .

в. Возбуждается одна частица, первоначально находившаяся в состоянии  $k$ , лежащем ниже области взаимодействия, в состояние, расположенное в области взаимодействия. Вклад энергии взаимодействия в энергию возбуждения будет даваться формулой (10.36), в которой надо положить  $\delta = 0$ ,  $v = 1$ . Кинетическая энергия будет больше, чем в основном состоянии, на величину  $\epsilon_F - \epsilon_k$ .

г. Возбуждается одна частица, первоначально находившаяся в состоянии  $k$ , лежащем ниже области взаимодействия, в состояние  $k'$ , расположенное выше области взаимодействия. Энергия возбуждения такого состояния равна разности соответствующих кинетических энергий и в точности совпадает с энергией возбуждения для невзаимодействующего ферми-газа.

Итак, энергия возбуждения каждого из рассмотренных состояний равна

$$E_a - E_g = G\Omega, \quad (10.4a)$$

$$E_b - E_g = G \left( \frac{1}{2} \Omega + 1 \right) + \varepsilon_k - \varepsilon_F, \quad (10.4b)$$

$$E_c - E_g = G \cdot \frac{1}{2} \Omega + \varepsilon_F - \varepsilon_k, \quad (10.4в)$$

$$E_d - E_g = \varepsilon_{k'} - \varepsilon_k. \quad (10.4г)$$

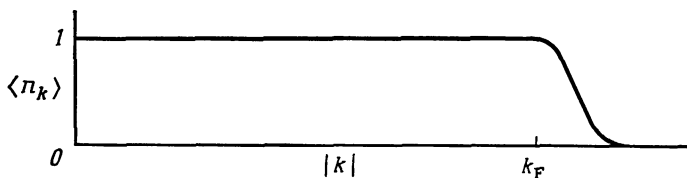
Эти выражения показывают, что вообще в рассматриваемой модели нет одночастичных возбуждений с произвольно малой энергией, какие есть в невзаимодействующем ферми-газе. Теперь всегда имеется минимальная энергия возбуждения, или «энергетическая щель». При возбуждении частиц, расположенных внутри области взаимодействия, энергетическая щель равна  $G\Omega$ ; при возбуждении частиц, не лежащих в области взаимодействия, энергетическая щель равна разности кинетических энергий фермиона на противоположных границах области взаимодействия.

Другая интересная особенность возбуждений состоит в том, что в них перепутываются частичные и дырочные состояния, расположенные в области взаимодействия. Так, например, в возбужденных состояниях типа «б» имеется одна возбужденная частица, расположенная вне области взаимодействия, но вместе с тем область взаимодействия с оставшейся одной неспаренной частицей вовсе не будет «дырочным» состоянием в смысле невзаимодействующего ферми-газа. Действительно, удаление одной частицы из области взаимодействия или добавление к ней одной неспаренной частицы оказывает влияние на движение всех остальных частиц (из-за принципа Паули). Таким образом, рассматриваемые возбужденные состояния — не просто одночастичные возбуждения в смысле невзаимодействующего ферми-газа. Хотя эти «квазичастичные» возбуждения и характеризуются квантовыми числами отдельных частиц, но могут быть как отдельными частицами, или обычными дырками, так и чем-то более сложным (как в рассмотренном примере возбужденных состояний, для которых изменение состояния одной частицы вызывает определенное изменение во всей остальной системе). Все четыре типа возбужденных состояний, рассмотренных выше, следовало бы классифицировать как «двухквазичастичные» возбуждения. Возбуждения невзаимодействующего ферми-газа, в которых возбуждается одна частица и одна дырка, тоже можно считать двухквазичастичными возбуждениями.

Упрощенный, редуцированный гамильтониан БКШ иногда называют «гамильтонианом БКШ в пределе сильной связи», так как с его помощью описывается тот предельный случай, когда

взаимодействие  $G$  (константа взаимодействия) настолько сильно, что можно пренебречь изменениями кинетической энергии фермионов в области взаимодействия по сравнению с взаимодействием этих частиц.

Для случая точного решения задачи с гамильтонианом БКШ (10.1), в котором учитываются изменения кинетической энергии фермионов в области взаимодействия, следует ожидать, что кривая зависимости  $\langle n_k \rangle$  от  $k$  будет размазанной по сравнению с кривой,



Фиг. 10.2.

изображенной на фиг. 10.1, т. е. она не будет иметь резких ступенек при  $k_F \pm \Delta k$ , а будет иметь вид кривой, изображенной на фиг. 10.2. Влияние оператора кинетической энергии в гамильтониане должно проявиться в уменьшении степени заполнения состояний, лежащих выше  $k_F$ , и в увеличении степени заполнения состояний, лежащих ниже  $k_F$ . В теории БКШ берется с самого начала такая пробная вариационная функция, которая может воспроизвести реалистический ход функции распределения  $\langle n_k \rangle$ , т. е. берется волновая функция с «размазанной ферми-сферой». Вариационными параметрами в волновой функции БКШ по существу и являются средние значения  $\langle n_k \rangle$ . Таким образом, форма распределения  $\langle n_k \rangle$  в теории БКШ определяется из вариационного принципа.

### § 3. Волновая функция БКШ и преобразование Боголюбова—Валатина

Волновая функция БКШ имеет следующий вид:

$$|\text{БКШ}\rangle = \prod_k \{u_k + v_k a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k\downarrow}^\dagger\} |0\rangle, \quad (10.5a)$$

где  $u_k$  и  $v_k$  — вещественные вариационные параметры, удовлетворяющие условию нормировки

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (10.5b)$$

Непосредственно легко показать, что среднее значение оператора числа частиц в рассматриваемом состоянии БКШ дается формулой

$$\langle \text{БКШ} | n_{k\uparrow} | \text{БКШ} \rangle = \langle \text{БКШ} | n_{-k\downarrow} | \text{БКШ} \rangle = |v_k^2|. \quad (10.5в)$$

Таким образом, изменяя значения вариационных параметров  $v_k$ , мы можем с помощью волновой функции БКШ представить произвольную функцию распределения значений  $\langle n_k \rangle$  (в частности, такую, какая изображена на фиг. 10.2).

Очевидно, что состояние (10.5а) не содержит строго определенного числа частиц. Каждый множитель в произведении имеет слагаемое  $u_k$ , которое не изменяет числа частиц, и слагаемое, пропорциональное  $v_k$ , которое добавляет по две частицы к системе. Таким образом, волновая функция БКШ является линейной комбинацией состояний, имеющих сильно различающиеся числа частиц. Хотя с первого взгляда это и кажется довольно неразумным, однако волновая функция БКШ на самом деле очень хорошо описывает основное состояние гамильтониана (10.1) для системы с большим числом частиц. На волновую функцию БКШ можно посмотреть просто как на функцию, характеризующую средние свойства некоторого ансамбля систем, обладающих различным числом частиц, т. е. ансамбля, аналогичного обычному большому каноническому ансамблю в статистической механике. Поскольку число частиц в сверхпроводнике очень велико, то флуктуации полного числа частиц в волновой функции БКШ должны быть сравнительно малы, и принятый способ рассмотрения не приведет к серьезным ошибкам.

Волновая функция БКШ (10.5) очень просто связана с волновой функцией «связанных пар» (6.7), которую мы рассматривали в простой модельной задаче в гл. 6. Волновую функцию (6.7) в случае полного импульса, равного нулю, можно записать следующим образом:

$$(D_0^\dagger)^m | 0 \rangle = \left\{ \sum_k (v_k/u_k) a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k\downarrow}^\dagger \right\}^m | 0 \rangle, \quad (10.6)$$

причем функцию  $g_k$  мы здесь заменили на  $v_k/u_k$ . Как видим, волновая функция (10.6) в точности совпадает с составляющей в волновой функции БКШ [см. (10.5а)], для которой число частиц равно  $2m$ . Эта  $2m$ -частичная составляющая полной волновой функции (10.5а) получится, если мы отберем в последней все возможные слагаемые, содержащие  $m$  множителей вида  $v_k a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k\downarrow}^\dagger$  и оставшиеся множители вида  $u_k$  (для всех других значений  $k$ ). Так мы найдем в точности функцию (10.6), умноженную на нормировочный множитель  $\prod_k u_k$ , поскольку функция (10.6) будет содержать все возможные произведения  $m$  множителей с такими же коэффициен-



тами, как и функция (10.5). Заметим, что все те слагаемые в функции (10.6), в которых один и тот же множитель с заданным  $k$  появляется по крайней мере дважды, обращаются в нуль, как это следует из фермионных антикоммутиационных соотношений. Так как различные  $g_k = v_k/u_k$  не все равны друг другу, как в простой квазиспиновой модельной задаче, проводить расчеты с рассматриваемой волновой функцией (10.6) совсем не просто. Именно волновую функцию БКШ, которая не имеет фиксированного числа частиц, намного удобнее использовать при конкретных расчетах.

Волновую функцию БКШ можно также связать с волновой функцией Хартри — Фока. Волновую функцию (10.5) можно считать функцией, описывающей «вакуумное состояние» для набора операторов рождения «квазичастиц». Действительно, легко видеть, что

$$(u_k a_{k\uparrow} - v_k a_{-k\downarrow}^\dagger) | \text{БКШ} \rangle = 0 = (v_k a_k^\dagger + u_k a_{-k\downarrow}) | \text{БКШ} \rangle. \quad (10.7)$$

Рассмотрим операторы

$$\alpha_{k\uparrow} = u_k a_{k\uparrow} - v_k a_{-k\downarrow}^\dagger, \quad (10.8a)$$

$$\alpha_{k\uparrow}^\dagger = u_k a_{k\uparrow}^\dagger - v_k a_{-k\downarrow}, \quad (10.8б)$$

$$\alpha_{k\downarrow} = u_k a_{k\downarrow} + v_k a_{-k\uparrow}^\dagger, \quad (10.8в)$$

$$\alpha_{k\downarrow}^\dagger = u_k a_{k\downarrow}^\dagger + v_k a_{-k\uparrow}. \quad (10.8г)$$

Эти операторы удовлетворяют тем же самым антикоммутиационным соотношениям, что и наши исходные фермионные операторы рождения и уничтожения. Поскольку операторы (10.8б) и (10.8г) увеличивают импульс на  $\hbar k$  и спин на  $s_z = \pm 1/2$  того состояния, на которое они действуют, их можно рассматривать как операторы, описывающие квазичастицы с импульсом  $\hbar k$  и спином, направленным «вверх» или «вниз» соответственно. Эти квазичастицы не являются ни «чистыми» частицами, ни «чистыми» дырками, а представляют собой линейные комбинации их обеих. Волновая функция БКШ описывает вакуумное состояние для данных квазичастиц, так как

$$\alpha_{k\uparrow} | \text{БКШ} \rangle = \alpha_{k\downarrow} | \text{БКШ} \rangle = 0. \quad (10.9)$$

Следовательно, волновая функция БКШ действительно является обобщением хартри-фоковской волновой функции. Она дает решение такой вариационной задачи, в которой вариация характеризуется самым общим линейным преобразованием операторов рождения и уничтожения частиц, в то время как для волновой функции Хартри — Фока запрещены линейные комбинации операторов рождения с операторами уничтожения. Такие линейные комбинации запрещены в теории, в которой полное число частиц сохраняется строго постоянным. По аналогии с хартри-фоковским

вариационным принципом можно ожидать, что матричные элементы гамильтониана, берущиеся между квазичастичным вакуумным состоянием БКШ и состояниями, содержащими по две квазичастицы, должны обращаться в нуль. Единственными неисчезающими матричными элементами должны быть диагональный матричный элемент и матричные элементы, связанные с возбуждением по крайней мере *четырёх* квазичастиц. Мы увидим ниже, что так оно и есть.

Расчеты в рамках вариационного принципа можно провести, пользуясь либо исходной формулой (10.5), либо каноническим преобразованием (10.8), предложенным Боголюбовым и Валатиным<sup>1)</sup> и позволяющим перейти от исходных к квазичастичным операторам. Ниже мы воспользуемся формулой (10.5), так как физический смысл появляющихся состояний и операторов намного проще понять, когда имеешь дело с реальными частицами, а не с квазичастицами.

Значения параметров  $u_k$  и  $v_k$  мы определим, минимизируя среднее значение гамильтониана (10.7). При этом требуется ввести дополнительное условие, так как, произвольно варьируя параметры  $u_k$  и  $v_k$ , мы можем изменить среднее число частиц в системе, чего делать нельзя. Процедура, позволяющая удерживать заданное значение  $N_0$  среднего числа частиц, заключается в минимизации среднего значения оператора  $H - \lambda N$ , где  $N$  — оператор полного числа частиц в системе, а  $\lambda$  — множитель Лагранжа, обычно называемый в статистической механике «химическим потенциалом». Значение  $\lambda$  следует определять из условия, согласно которому среднее значение оператора  $N$  должно быть равно  $N_0$ , т. е. заранее заданному числу частиц. Оператор числа частиц имеет такой же вид, как оператор кинетической энергии, так что оба

<sup>1)</sup> В примечании на стр. 151 мы уже указывали на несправедливость автора в отношении работ Боголюбова по микроскопической теории сверхпроводимости. Отметим, что теорию Бардина — Купера — Шриффера — Боголюбова автор здесь излагает, повторяя *слово в слово* основную работу Боголюбова 1958 г. и даже пользуясь обозначениями, впервые введенными Боголюбовым (в частности  $u_k, v_k$ ). Так поступают и многие другие авторы. Напрашивается резонный вопрос: почему же изложение теории БКШ ведется во всех книгах и руководствах не по оригинальной работе Бардина — Купера — Шриффера или по работе Валатина, а именно по работам Боголюбова 1958 г. (написанным им в конце 1957 г. до знакомства с препринтом основной работы БКШ)?

Кстати сказать, впервые идею об использовании в теории БКШ — Боголюбова спиновых (или как автор называет их «квазиспиновых» операторов) высказал и успешно использовал Боголюбов в одной работе 1958 г.

Работу Валатина никогда и никто не пытался развивать, впрочем как и сам Валатин. В отношении дальнейшей разработки математических идей теории БКШ — Боголюбова до настоящего времени, к сожалению, сделано очень мало. Главу 6 этой книги, в которой автор излагает свою собственную работу, можно рассматривать как существенное и оригинальное дополнение к ним. — *Прим. ред.*

эти оператора легко объединить, и таким образом мы получим

$$H - \lambda N = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \lambda) a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - \sum_{kk'} G_{kk'} a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k\downarrow}^\dagger a_{-k'\downarrow} a_{k'\uparrow}. \quad (10.10)$$

Химический потенциал, как видим, просто сдвигает нулевой уровень отсчета одночастичных энергий.

Среднее значение оператора (10.10) для волновой функции БКШ легко рассчитать; оно равно

$$\langle \text{БКШ} | H - \lambda N | \text{БКШ} \rangle = \sum_k 2(\varepsilon_k - \lambda) v_k^2 - \sum_{kk'} G_{kk'} u_k v_k u_{k'} v_{k'}. \quad (10.11)$$

Если это среднее значение минимизировать относительно изменений  $v_k$ , то легко можно получить уравнение

$$2(\varepsilon_k - \lambda) u_k v_k = \left( \sum_{k'} G_{kk'} u_{k'} v_{k'} \right) (u_k^2 - v_k^2). \quad (10.12)$$

Требование, налагаемое на среднее число частиц, дает еще одно условие

$$\sum_k 2v_k^2 = N_0. \quad (10.13)$$

Из системы двух уравнений (10.12) и (10.13) можно определить значения вариационного параметра  $v_k$  и химического потенциала  $\lambda$ , но явный вид решения довольно сложен, и лучше всего его находить численно. Отметим, что для бесконечной системы величины  $u_k$  и  $v_k$  являются непрерывными функциями переменной  $k$  и потому уравнение (10.12) будет интегральным уравнением.

Решение системы (10.12), (10.13) упрощается в частном случае, когда матричный элемент взаимодействия  $G_{kk'} = G$  в некоторой области значений  $k$ , как в формуле (10.2). В этом случае удобно рассмотреть величину

$$\Delta \equiv \sum_{k'} G_{kk'} u_{k'} v_{k'} = G \sum_k u_k v_k. \quad (10.14)$$

Тогда уравнение (10.12) примет вид

$$2(\varepsilon_k - \lambda) u_k v_k = \Delta (u_k^2 - v_k^2). \quad (10.15)$$

Возводя в квадрат (10.15) и вспоминая, что  $u_k^2 + v_k^2 = 1$ , мы получаем соотношение

$$4(\varepsilon_k - \lambda)^2 u_k^2 v_k^2 = (\varepsilon_k - \lambda)^2 [1 - (u_k^2 - v_k^2)^2] = \Delta^2 (u_k^2 - v_k^2)^2, \quad (10.16)$$

из которого имеем

$$u_k^2 - v_k^2 = \frac{\varepsilon_k - \lambda}{[(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}}, \quad (10.17a)$$

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\varepsilon_k - \lambda}{[(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \right], \quad (10.17б)$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{[(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \right]. \quad (10.17в)$$

Формулы (10.17) выражают  $u_k$  и  $v_k$  через параметры  $\lambda$  и  $\Delta$ , которые пока что неизвестны. Вместе с тем уже на этом этапе некоторые характерные особенности отыскиваемой волновой функции хорошо видны. В частности, кривая зависимости  $v_k^2$  от  $k$  действительно имеет вид кривой, изображенной на фиг. 10.2. Заметим, что  $v_k^2$  — монотонно убывающая функция  $\epsilon_k$ , и, когда  $\epsilon_k = \lambda$ ,  $v_k^2 = 1/2$ , т. е. вероятность найти частицу в этом состоянии в точности равна  $1/2$ . При  $\epsilon_k \gg \lambda$   $v_k^2 = 0$ , а при  $\epsilon_k \ll \lambda$   $v_k^2 = 1$ . Следовательно, кривая зависимости  $v_k^2$  от  $k$  падает от 1 до 0 в окрестности энергии  $\epsilon_k = \lambda$ . Это падение плавное, а не резкое как для невзаимодействующего ферми-газа, и происходит в энергетической области размером порядка  $\Delta$ . Чтобы среднее число частиц получилось правильным, параметр  $\lambda$  должен лежать где-то в окрестности  $\epsilon_F$ , как это видно из (10.13).

#### § 4. Спектр возбуждений и энергетическая щель

Теперь мы можем найти квазичастичный спектр возбуждений. Начнем с того, что рассмотрим волновую функцию

$$|k\uparrow\rangle = \frac{1}{u_k} a_{k\uparrow}^\dagger |\text{БКШ}\rangle. \quad (10.18)$$

Поскольку квадрат любого фермионного оператора равен нулю, то при действии оператора  $a_{k\uparrow}^\dagger$  на волновую функцию БКШ [см. (10.5)] в ней пропадает слагаемое  $v_k a_{k\uparrow}^\dagger a_{-k\downarrow}^\dagger$ , а вместо постоянного слагаемого  $u_k$  появляется оператор рождения  $a_{k\uparrow}^\dagger$ . Состояние (10.18), таким образом, таково, что в нем одночастичное состояние  $k\uparrow$  определено занято частицей, а состояние  $-k\downarrow$  определено не занято; остальные одночастичные состояния частично заняты (как в основном состоянии БКШ). Состояние (10.18) можно рассматривать как состояние, которое получается, если добавить к основному состоянию БКШ квазичастицу в состоянии  $k\uparrow$ . При таком добавлении частицы к этому состоянию многочастичной системы изменяются состояния всех других частиц, так как два состояния  $k\uparrow$  и  $-k\downarrow$  становятся для частиц недоступными.

Посмотрим теперь, как изменится среднее значение гамильтониана (10.11), если вместо основного состояния БКШ мы возьмем «одноквазичастичное» состояние (10.18). Единственно, что может измениться в (10.11), — это слагаемые, которые содержат наше выделенное квазичастичное состояние  $k$ . Первое слагаемое (кинетическая энергия) изменится так, что в нем суммарное заполнение состояний  $k\uparrow$ ,  $-k\downarrow$  станет равно 1 вместо  $2v_k^2$ . Второе слагаемое (взаимодействие) изменится следующим образом: в сумме по обоим индексам пропадут слагаемые, содержащие наше выделенное состояние  $k$ , так как соответствующие операторные члены в гамиль-

тониане (10.10) теперь дадут нуль при действии на состояние (10.18). Поскольку одно из двух спаренных состояний  $k\uparrow$ , —  $k\downarrow$  занято, а другое не занято, то невозможно ни добавить пару частиц, ни удалить пару частиц, находящихся в этих состояниях. Разность энергий состояния (10.18) и основного состояния, таким образом, равна

$$E_k = \langle k\uparrow | H - \lambda N | k\uparrow \rangle - \langle \text{БКШ} | H - \lambda N | \text{БКШ} \rangle = \\ = (1 - 2v_k^2)(\epsilon_k - \lambda) + 2\Delta u_k v_k \quad (10.19)$$

Используя (10.15) и (10.17), получаем

$$E_k = (u_k^2 - v_k^2)(\epsilon_k - \lambda) + \frac{\Delta^2}{(\epsilon_k - \lambda)}(u_k^2 - v_k^2), \quad (10.20a)$$

$$E_k = \frac{(\epsilon_k - \lambda)^2}{[(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} + \frac{\Delta^2}{[(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}}, \quad (10.20b)$$

$$E_k = [(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}. \quad (10.20в)$$

При  $\Delta = 0$  и  $\lambda = \epsilon_F$  эта формула дает в точности энергию того одночастичного возбужденного состояния невзаимодействующего ферми-газа, которое соответствует либо добавлению частицы в состоянии  $k$ , расположенном выше ферми-сферы, либо удалению частицы (т. е. добавлению дырки) в состоянии  $k$ , находящемся внутри сферы Ферми. При  $\Delta \neq 0$  энергия  $E_k$  при любом  $k$  всегда больше энергии невзаимодействующего ферми-газа, и при  $\epsilon_k = \lambda$  она достигает своего минимального конечного значения  $\Delta$ . Величина  $\Delta$ , таким образом, представляет собой энергетическую щель в квазичастичном спектре.

Состояние (10.18), очевидно, не может быть возбужденным состоянием такой системы, основное состояние которой описывается волновой функцией (10.5) [так как состояние (10.18) есть линейная комбинация состояний, обладающих нечетным числом частиц, в то время как состояние (10.5) есть линейная комбинация состояний, обладающих четным числом частиц]. Чтобы получить возбужденные состояния системы, мы должны возбудить четное число квазичастиц. Это соответствует рождению некоторого числа частично-дырочных пар в случае невзаимодействующего ферми-газа.

Из вида нашего гамильтониана и вида волновых функций непосредственно следует, что энергии квазичастиц складываются аддитивно (если не обращать внимания на очень малые поправки). При добавлении каждой новой квазичастицы в правой части (10.11) изменяется соответствующее слагаемое в кинетической энергии и исчезают определенные слагаемые из энергии взаимодействия. Складывая энергию квазичастицы в состоянии  $k'$  с энергией квазичастицы в состоянии  $k''$ , мы получаем энергию «двух-квазичастичного» состояния нашей системы, хотя и с небольшой

ошибкой, потому что дважды учитываем то слагаемое во взаимодействии, которое одновременно связано с  $k'$  и  $k''$ . Если полное число состояний в сумме во взаимодействии очень велико, то это приводит лишь к незначительной ошибке. Еще одна (тоже небольшая) ошибка происходит от изменения среднего числа частиц в системе после добавления к ней одной квазичастицы (если эта квазичастица находится в состоянии, для которого  $v_k^2$  не равно в точности  $1/2$ ). Эта поправка также мала, когда полное число частиц в системе очень велико.

Концепция «частиц» и «дырок», полезная в теории невзаимодействующего ферми-газа, строго говоря, теперь теряет смысл. Состояние (10.18) мы получили, добавив одну частицу к основному состоянию, но его можно было бы получить, добавив к нему дырку. Действительно,

$$|k \uparrow\rangle = \frac{1}{u_k} a_{k \uparrow}^\dagger |BKШ\rangle = \frac{1}{v_k} a_{-k \downarrow} |BKШ\rangle. \quad (10.21)$$

Квазичастица, таким образом, не является ни частицей, ни дыркой, а наделена свойствами и той и другой. Двухквазичастичное состояние аналогично частично-дырочному возбуждению в невзаимодействующем ферми-газе. Из формул (10.20) мы видим, что если параметр  $\Delta$  не равен нулю, то в квазичастичном спектре возбуждений имеется энергетическая щель.

Найдем теперь параметр  $\Delta$  энергетической щели. Из (10.14) и (10.15) имеем

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_k \left\{ \frac{\Delta}{(\epsilon_k - \lambda)} (u_k^2 - v_k^2) \right\} = \Delta \frac{G}{2} \sum_k \frac{1}{[(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}}. \quad (10.22)$$

Уравнение (10.22), очевидно, имеет тривиальное решение  $\Delta = 0$ . Оно не дает энергетической щели. Для этого решения из (10.17в) мы видим, что  $v_k^2 = 1$  при  $\epsilon_k < \lambda$  и  $v_k^2 = 0$  при  $\epsilon_k > \lambda$ , так что волновая функция БКШ будет в точности совпадать с волновой функцией основного состояния невзаимодействующего ферми-газа. Это так называемое «нормальное состояние» нашей системы, и для него параметр  $\lambda$  должен равняться  $\epsilon_F$ , что определяет соответствующее значение полного числа частиц в системе.

Нетривиальное, или «сверхпроводящее», решение  $\Delta \neq 0$  получается как решение уравнения

$$1 = \frac{G}{2} \sum_k 1 - \frac{1}{[(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}}. \quad (10.23)$$

Химический потенциал  $\lambda$  определяется из условия

$$\sum_k 2v_k^2 = \sum_k \left\{ 1 - \frac{\epsilon_k - \lambda}{[(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \right\} = N_0. \quad (10.24)$$

Когда энергетические размеры области взаимодействия малы по сравнению с энергией Ферми, тогда плотность состояний с заданным спином, приходящаяся на единицу энергии, в области взаимодействия можно считать постоянной. Обозначим эту плотность через  $\rho$  и перейдем от суммы (10.24) к интегралу. Найдем далее такую величину  $\omega$ , чтобы все размытие сферы Ферми простиралось от  $\lambda - \omega$  до  $\lambda + \omega$ , т. е. чтобы ниже  $\lambda - \omega$  мы имели  $v_k = 1$ , а выше  $\lambda + \omega$  имели  $v_k = 0$ .

Тогда

$$\sum_{\substack{k \\ \varepsilon < (\lambda - \omega)}} 2 + \int_{\lambda - \omega}^{\lambda + \omega} \rho \left\{ 1 - \frac{\varepsilon - \lambda}{[(\varepsilon - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \right\} d\varepsilon = N_0. \quad (10.25)$$

В силу симметрии области интегрирования относительно точки  $\varepsilon = \lambda$  второе слагаемое в интеграле даст нуль и левая часть формулы (10.25) окажется в точности равной полному числу фермионов в системе, которые располагаются в состояниях, лежащих ниже энергии  $\lambda$ . Таким образом,

$$\lambda = \varepsilon_F. \quad (10.26)$$

Найдем теперь параметр  $\Delta$  энергетической щели, преобразуя сумму в (10.23) в интеграл и вычисляя этот интеграл. Пределами интегрирования будут границы области взаимодействия, выраженные в энергетических единицах. Если взять параметр  $\omega$  таким, чтобы область взаимодействия простиралась от  $\lambda - \omega$  до  $\lambda + \omega$ , то получим

$$1 = \frac{1}{2} G\rho \int_{\lambda - \omega}^{\lambda + \omega} \frac{d\varepsilon}{[(\varepsilon - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} = G\rho \operatorname{arc sh} \left( \frac{\omega}{\Delta} \right). \quad (10.27)$$

Следовательно,

$$\Delta = \frac{\omega}{\operatorname{sh} \frac{1}{G\rho}}. \quad (10.28)$$

В предельном случае связи ( $G\rho \gg 1$ ) имеем

$$\Delta \approx G\rho\omega \approx \frac{1}{2} G\Omega \quad (G \gg 1), \quad (10.29)$$

где  $\Omega = 2\rho\omega$  — полное число состояний, уместяющихся в области взаимодействия для электронов с заданным значением спина; эту величину мы уже рассматривали в упрощенной модельной задаче в § 2 настоящей главы. Так как энергетическая щель равна  $2\Delta$  при возбуждении двух квазичастиц, формула (10.29) полностью согласуется с точной формулой (10.4а), полученной в предельном случае сильной связи.

Предельный случай слабой связи  $G\rho \ll 1$  важен для реальных сверхпроводников. В этом случае мы имеем

$$\Delta \approx 2\omega e^{-(1/G\rho)} \quad (G\rho \ll 1). \quad (10.30)$$

Функции (10.28) и (10.30) не являются аналитическими функциями  $G$  при  $G = 0$ . Они имеют существенную особенность в этой точке; их нельзя разложить в ряд по степеням параметра  $G$  в окрестности  $G = 0$ . Если бы мы применили к гамильтониану БКШ теорию возмущений, приняв все взаимодействие за возмущение, то должны были бы получить результат в виде ряда по степеням  $G$ . Так как решение ведет себя неаналитически, то этот ряд теории возмущений не может привести к правильному результату.

Формула для параметра  $\Delta$  энергетической щели имеет следующее свойство. Параметр  $\Delta$  пропорционален величине  $\omega$ , имеющей размерность энергии и характеризующей размеры области значений одночастичных энергий, в которой проявляется взаимодействие. Но вместе с тем параметр  $\Delta$  имеет совершенно иной порядок величины, чем  $\omega$ , так как величина  $\omega$  умножается на безразмерный экспоненциальный множитель, который может принимать очень малые значения. Для реальных сверхпроводников параметр  $\Delta$  на два порядка величины меньше  $\omega$ . Параметр  $\Delta$  энергетической щели можно характеризовать величиной критической температуры сверхпроводящего перехода, т. е. величиной тепловой энергии, необходимой для разрушения сверхпроводящего состояния. Для реальных сверхпроводников эта температура имеет порядок величины нескольких градусов Кельвина. Далее, энергетическая область  $\omega$ , в которой разыгрывается взаимодействие, имеет порядок энергий колебаний решетки (фононов), т. е. несколько сотен градусов Кельвина.

Теория БКШ очень хорошо описывает многие свойства сверхпроводников, в частности сверхпроводящие незатухающие токи, эффект Мейснера, электромагнитные свойства. Качественно ток связанных пар ведет себя так, как описано выше в рамках простой модели в § 4 гл. 6.

### § 5. Парные корреляции в ядрах

Теорию, изложенную в § 4 гл. 6, можно непосредственно применить к объяснению парных корреляций и квантового числа сеньорити в случае одной оболочки в модели ядерных оболочек с  $jj$ -связью. Действительно, вследствие предполагаемой сферической симметрии ядра все одночастичные состояния, принадлежащие одной оболочке, имеют одну и ту же хартри-фоковскую энергию, поэтому нам необходимо диагонализировать только гамильтониан взаимодействия. Если имеется несколько ядерных оболочек, то обобщенная теория квантового числа сеньорити [см. (6.39)] хо-



рошо описывает только предельный случай сильной связи, т. е. случай, в котором разностями хартри-фоковских энергий для различных оболочек можно пренебречь. Для реальных состояний ядер эти разности энергий, однако, обязательно надо учитывать и рассматривать гамильтониан, подобный гамильтониану (10.1), в котором  $\epsilon_k$  — хартри-фоковские энергии, а индексы одночастичных состояний необходимо представить как индексы соответствующих сферически-симметричных базисных функций, так что гамильтониан взаимодействия нужно записать в виде (6.39б). Мы можем далее использовать теорию БКШ, и в частности рассмотреть волновую функцию БКШ [см. (10.5)]. Решение для гамильтониана (6.39б) надо искать так же, как для сверхпроводника, но с тем отличием, что теперь вместо  $\epsilon_k$  надо брать одночастичные хартри-фоковские энергии, а вместо однофермионных состояний — орбитали модели ядерных оболочек. В уравнениях теории БКШ (10.23) и (10.24) суммы остаются дискретными, и эти уравнения надо решать численно.

В случае ядра уравнение (10.23) имеет решение при условии, что «сила» взаимодействия  $G$  оказывается большей некоторого критического значения. Действительно, легко убедиться в этом, если записать уравнение (10.23) в виде

$$\frac{1}{G} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{[(\epsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \leq \frac{1}{2} \sum_k \frac{1}{|\epsilon_k - \lambda|}. \quad (10.34)$$

Так как суммирование в правой части (10.34) ведется по дискретным состояниям, правая часть неравенства (10.34) конечна, и она определяет нижнюю границу значений  $G$ , для которых все еще существуют нетривиальные решения. Этой границы нет в случае сверхпроводника, для которого спектр одночастичных состояний практически непрерывен и для которых последняя сумма в правой части (10.34) либо бесконечна, либо имеет огромную величину, пропорциональную размерам образца. Следовательно, для сверхпроводника всегда существует решение (10.34) для сколь угодно малого  $G$ .

Формализм теории БКШ можно применить в теории деформированных ядер, для которых хартри-фоковские состояния не являются сферически-симметричными. Для этих ядер одночастичные энергии  $\epsilon_k$ , входящие в (10.1), будут энергиями деформированного самосогласованного потенциала и будут зависеть не только от  $j$ , но и от  $m$ . Формальное решение нужно искать в точности так же, как в сферически-симметричном случае при наличии нескольких оболочек или как для сверхпроводника.

Теория БКШ плодотворно применялась для исследования структуры тяжелых ядер при наличии смешивания конфигураций различных оболочек.

## Глава 11. ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ

### § 1. Два примера многочастичных систем

В приближении Хартри — Фока пренебрегают «остаточным» двухчастичным взаимодействием и корреляциями между движениями отдельных частиц. Чтобы проиллюстрировать проблемы, связанные с корреляциями, и способы описания остаточного взаимодействия, рассмотрим здесь две системы: макроскопический электронный газ, для которого известен вид точного гамильтониана, и атомное ядро  $^{16}\text{O}$ , для которого используется «модельный» гамильтониан, содержащий параметры, не известные нам а priori. Мы покажем, как один и тот же математический формализм можно успешно применять к обеим системам и как его пригодность можно оправдать на основе совершенно различных соображений в обоих указанных случаях.

Сперва рассмотрим свободный электронный газ, движущийся в поле фона однородного положительного заряда (вводимого для того, чтобы система была электрически нейтральной). Этот газ может служить упрощенной моделью для электронов проводимости металла или для электронов плазмы, для которой разумно предположить, что положительные ионы можно заменить континуумом однородно распределенного положительного заряда. Для удобства электронный газ заключим в кубический «ящик» и будем считать, что на границах последнего выполняются периодические условия. Гамильтониан состоит из оператора, кинетической энергии и оператора кулоновского взаимодействия (между электрическими зарядами отдельных частиц и электрическим зарядом фона)

$$H = \sum_i (p_i^2/2m) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_i V(r_i); \quad (11.1)$$

здесь  $V(r_i)$  — потенциал, создаваемый однородным фоном положительного заряда.

В качестве нулевой многоэлектронной волновой функции системы возьмем функцию, построенную на базисе одночастичных плоских волн, удовлетворяющих граничным условиям в нашем ящике и являющихся собственными функциями оператора кинетической энергии электронов. Основным состоянием системы бу-

дет тогда «ферми-сфера» в импульсном пространстве, внутри которой все одноэлектронные состояния заняты. Волновая функция основного состояния является точным решением соответствующих уравнений Хартри — Фока, поскольку при кулоновском взаимодействии сохраняется импульс и все матричные элементы при возбуждении только одной частицы в сфере Ферми равны нулю. Многие физические эффекты в металлах, например электропроводность, можно очень хорошо объяснить с помощью простых волновых функций рассматриваемого типа, т. е. когда можно не принимать во внимание отличные от нуля недиагональные матричные элементы межэлектронного кулоновского взаимодействия. Остающиеся неуточненным так называемое «остаточное» взаимодействие нельзя рассматривать с помощью простой теории возмущений. В теории возмущений вклад второго порядка в энергию основного состояния оказывается бесконечным, а вклады более высоких порядков приводят к еще более сильно расходящимся интегралам. Ниже мы покажем, в чем причина появления таких расходимостей, и объясним, почему рассматриваемые нами сейчас «плохие» волновые функции все же дают «хорошие» приближения для целого ряда физических величин.

Теперь рассмотрим ядро  $^{16}\text{O}$ . В гамильтониан этой системы в рамках модели ядерных оболочек входят одночастичные потенциалы  $V(\mathbf{r}_i)$  и двухчастичные потенциалы остаточного взаимодействия  $v_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ :

$$H = \sum_i (p_i^2/2m) + \sum_i V(\mathbf{r}_i) + \sum_{i>j} v_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (11.2)$$

В то время как электронный газ содержит огромное число частиц, ядро  $^{16}\text{O}$  имеет только 16 частиц. Гамильтониан электронного газа нам точно известен: в него входит известное кулоновское электростатическое взаимодействие. Гамильтониан (11.2) содержит потенциалы  $V(\mathbf{r}_i)$ , которые мы не знаем, как получить из первых принципов, и «остаточное взаимодействие», которое тоже не ясно, откуда брать и даже как четко определить. Казалось, можно было бы считать, что этот одночастичный потенциал  $V(\mathbf{r}_i)$  является хартри-фоковским потенциалом, соответствующим истинному двухнуклонному взаимодействию. Однако все дело в том, что именно это истинное двухнуклонное взаимодействие нам до сих пор и не известно. Кроме того, при отыскании решения соответствующих хартри-фоковских уравнений для истинного потенциала нуклон-нуклонного взаимодействия мы сталкиваемся с трудностью другого рода, связанной с тем, что потенциал  $V(\mathbf{r}_i)$  имеет сильную отталкивательную сердцевину. Его поэтому приходится брать обычно ad hoc, т. е. «с потолка». (Фактически потенциал  $V(\mathbf{r}_i)$  необходимо выбрать так, чтобы развиваемая теория воспроизводила имеющиеся экспериментальные данные об атомных ядрах.)

Возьмем такую нулевую волновую функцию рассматриваемой многонуклонной системы, которая будет описывать отдельные частицы, движущиеся каждая на своей одночастичной орбитали, определенной потенциалом  $V(r_i)$ . Самой нижней является орбиталь  $1s$ , следующая за ней — орбиталь  $1p$ . Так как спины протона и нейтрона имеют по две ориентации, орбиталь —  $1s$  может содержать четыре нуклона, а орбиталь  $1p$  — 12 нуклонов. Следовательно, в нулевой волновой функции основного состояния для ядра  $^{16}\text{O}$  орбитали  $1s$  и  $1p$  оказываются полностью занятыми (т. е. мы имеем «двойную» заполненную оболочку). Самая низкая возбужденная волновая функция имеет, таким образом, одну возбужденную частицу, перемещенную из  $p$ -оболочки в состояние какой-либо другой оболочки (например на орбиталь  $2s$  или  $1d$ ). Такие возбуждения можно рассматривать как «частично-дырочные» возбуждения основного состояния, так как в них одна частица удаляется из заполненной оболочки (в этой оболочке рождается дырка) и переводится в некоторую незаполненную оболочку (в последней рождается возбужденная частица).

Описанные «частично-дырочные» возбуждения основного состояния особенно интересны в обоих рассматриваемых системах, так как получаются в результате действия некоторого простого одночастичного оператора на волновую функцию основного состояния; такие возбуждения возникают, например, при поглощении фотона или при рассеянии электрона в борновском приближении. Хотя действие одночастичного оператора на основное состояние, волновая функция которого имеет простой одночастичный вид, тривиально, однако действие его на волновую функцию основного состояния, которая *не* имеет простого одночастичного вида, очень сложно.

Существуют весьма веские причины считать, что разобранные простое *одночастичное* описание не соответствует действительности ни в одной из двух рассмотренных систем. Действительно, в случае электронного газа имеется катастрофа со вторым порядком теории возмущений. Для ядра  $^{16}\text{O}$  (для него  $a \approx 10^{-15}$  м мы вообще не располагаем строгой теорией) это непосредственно следует из экспериментов. Таким образом, в обоих случаях перед нами встает одна и та же задача: как рассчитать спектр одночастичных возбуждений (например, возбуждаемый при поглощении фотона) для системы вполне определенного типа, используя нулевую волновую функцию одночастичного вида, о которой известно, что она является *плохой* волновой функцией.

Займемся теперь детальным рассмотрением обоих наших систем, помня, что мы хотим построить спектр возбуждений, рождаемых одночастичными операторами специального вида, и что нас совершенно не интересуют другие аспекты рассматриваемых систем.

Нам удобно представить гамильтонианы для обеих наших систем в формализме вторичного квантования. Для электронного газа мы возьмем в качестве исходного хартри-фоковский базис плоских волн и разложим кулоновское взаимодействие в ряд Фурье

$$\sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \sum_k \sum_{i>j} v_k e^{ik \cdot (r_i - r_j)}, \quad (11.3a)$$

причем здесь коэффициенты разложения  $v_k$  даются формулой

$$v_k = 4\pi e^2 / k^2 \Omega, \quad (11.3b)$$

где  $\Omega$  — объем «нормировочного ящика».

Выражение (11.3a) можно легко преобразовать к виду, позволяющему просто перейти к операторам вторичного квантования. Сделаем суммы по  $i$  и  $j$  независимыми. Этого можно добиться, прибавив и вычтя в (11.3a) сумму с  $i = j$ , а также введя дополнительный множитель  $1/2$ , чтобы скомпенсировать двойной учет членов, связанный с тем, что  $i$  и  $j$  пробегает независимые значения:

$$\sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_k v_k \left[ \left( \sum_i e^{ik \cdot r_i} \right) \left( \sum_j e^{-ik \cdot r_j} \right) - n \right]. \quad (11.4)$$

Здесь  $n$  — полное число частиц в системе; вычитать  $n$  в выражении в квадратных скобках нужно, чтобы отбросить члены с  $i = j$  в первом слагаемом.

Вклад от слагаемого  $k = 0$  в сумме по  $k$ , который сингулярен, в точности сокращается с вкладом от потенциала однородно размазанного положительного заряда. Теперь, используя (11.4), наш гамильтониан совсем легко выразить через операторы вторичного квантования. Пусть  $c_{k\sigma}^\dagger$  означает оператор рождения электрона с импульсом  $\hbar k$  и спином  $\sigma$  ( $\sigma = \pm 1$  для спина, направленного соответственно «вверх» и «вниз»). Тогда

$$H = \sum_p \frac{(\hbar p)^2}{2m} c_{p\sigma}^\dagger c_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} v_k \left\{ \sum_p c_{p+k, \sigma}^\dagger c_{p\sigma} \sum_q c_{q\sigma}^\dagger c_{q+k, \sigma} \right\}. \quad (11.5)$$

Комбинация операторов рождения и уничтожения, появившаяся в гамильтониане взаимодействия (11.5), оказывается в точности фурье-компонентой оператора плотности электронов, который для системы электронов можно представить суммой  $\delta$ -функций, обращающихся в бесконечность в точках, где находятся электроны, и равных нулю во всех остальных точках:

$$\rho(r) = \sum_i \delta(r - r_i) = \sum_k \sum_i e^{ik \cdot r} e^{-ik \cdot r_i} = \sum_k \rho_k e^{ik \cdot r}. \quad (11.6a)$$

Входящая в (11.6а) фурье-компонента  $\rho_k$  электронной плотности дается выражением

$$\rho_k = \sum_l e^{-ik \cdot r_l}. \quad (11.66)$$

Кулоновское взаимодействие (11.4), таким образом, можно представить в виде

$$\frac{1}{2} \sum_k v_k (\rho_k^* \rho_k - n). \quad (11.6в)$$

Гамильтониан для ядра  $^{16}\text{O}$  в формализме вторичного квантования удобнее всего записать, используя базис одночастичных состояний модели ядерных оболочек, т. е. базис, каждое состояние которого характеризуется радиальным квантовым числом  $n$ , квантовым числом орбитального момента количества движения  $l$ , квантовым числом полного момента количества движения  $j$  и квантовым числом  $m$  (проекции полного момента количества движения на ось  $z$ ). Для удобства будем использовать один индекс  $k$  для обозначения четырех квантовых чисел  $n, l, j, m$ . Пусть  $a_k^\dagger$  означает оператор рождения нуклона в состоянии  $k$ . Тогда гамильтониан ядра можно записать в следующем виде:

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \sum_{k'k''k''',k^{IV}} \langle k^{IV}k''' | V | k''k' \rangle a_{k^{IV}}^\dagger a_{k'''}^\dagger a_{k''} a_{k'}, \quad (11.7)$$

где  $\varepsilon_k$  — энергии собственных одночастичных состояний для потенциала модели ядерных оболочек. Коэффициенты, появляющиеся в гамильтониане взаимодействия в (11.7), представляют собой матричные элементы для «остаточного» взаимодействия. Обратим внимание на различие гамильтонианов (11.5) и (11.7). Гамильтониан для электронного газа задан полностью и содержит только общеизвестные физические постоянные. Гамильтониан для ядра  $^{16}\text{O}$  включает в качестве неопределенных параметров одночастичные энергии  $\varepsilon_k$  и матричные элементы взаимодействия, которые мы не знаем, как определить, исходя только из первых принципов. Какие-то конкретные значения этих параметров надо, конечно, ввести в задачу с самого начала. Однако, как мы покажем ниже, значения параметров почти всегда выбирают после проведения всех вычислений из экспериментальных данных, и поэтому на их выбор неизбежно влияют те приближения, которые мы делаем при решении задачи.

## § 2. Стационарные и гигантские резонансные состояния

Рассмотрим эффективное сечение поглощения фотона электронным газом. Пусть в некоторой заданной области энергий экспериментально наблюдаемое эффективное сечение имеет резкий пик, как это показано на фиг. 11.1. Этому пику можно дать два объяснения.

Во-первых, можно считать, что существует такое *одно* состояние системы, которое является собственным состоянием ее гамильтониана и для которого матричный элемент перехода в него



Фиг. 11.1.

из основного состояния для процесса поглощения фотона имеет очень большую величину, в то время как для переходов в другие соседние с ним состояния в этой энергетической области матричные элементы очень малы. Тогда говорят, что вся «сила» перехода в эту энергетическую область *сосредоточена только на одном особом состоянии нашей системы*.

Во-вторых, можно считать, что «сила» наблюдаемого перехода *распределена между большим числом состояний*, которые являются собственными состояниями гамильтониана и которые очень близко расположены по энергии друг к другу. Такое размазывание силы перехода по многим уровням, принадлежащим малой энергетической области, часто называют «гигантским резонансом». Если пик на фиг. 11.1 связан с одним состоянием, то он должен иметь очень узкую ширину, равную в точности ширине естественной линии, определяемой вероятностью обратного радиационного перехода в основное состояние (с излучением фотона), а также другими возможными безызлучательными переходами в него. Если пик на фиг. 11.1 связан с гигантским резонансом, то его ширина характеризуется *динамикой* системы, причем можно наблюдать тонкую структуру этого пика, когда энергетические расстояния между стационарными состояниями системы, дающими вклады в гигантский резонанс, оказываются больше естественной ширины отдельной линии.

Гигантский резонанс можно связать также и с *одним* состоянием системы, которое, однако, никоим образом не будет собственным состоянием ее гамильтониана. Оно будет представлять собой линейную комбинацию собственных состояний, берущихся из малой энергетической области, т. е. оно является как бы «волновым пакетом» состояний, вбирающим в себя всю «силу» рассматриваемого квантового перехода. Коэффициенты перед собственными состояниями в этой линейной комбинации пропорциональны значениям матричных элементов переходов в соответствующие собственные состояния. Гигантское резонансное состояние не будет приближенным собственным состоянием гамильтониана и в смысле теории возмущений, так как оно — линейная комбинация многих собственных состояний, каждое из которых входит в эту комбинацию с очень малым весом. И вместе с тем гигантское резонансное состояние можно рассматривать в некотором смысле как приближенное «стационарное состояние» нашей системы, так как если система находится в нем в начальный момент времени  $t = 0$ , то она будет *продолжать оставаться* в этом состоянии и в течение долгого промежутка времени, определяемого величиной энергетической ширины рассматриваемого гигантского резонанса. Если взять решение временного уравнения Шредингера в виде линейной комбинации стационарных состояний с крайне мало различающимися частотами, то легко убедиться, что построенное состояние будет оставаться в области гигантского резонанса с очень хорошим приближением до тех пор, пока различные компоненты в линейной комбинации не разойдутся достаточно сильно «по фазе». «Время жизни» рассматриваемого состояния, таким образом, дается обратной величиной «частотной» ширины разложения.

Количественно все это можно представить следующим образом. Пусть  $M$  означает оператор квантового перехода системы с поглощением одного фотона с заданными значениями квантовых чисел (например, возьмем «электрический дипольный переход»). Тогда амплитуда перехода в данное возбужденное собственное состояние  $|E'\rangle$  с энергией  $E'$  нашего гамильтониана будет пропорциональна значению матричного элемента  $\langle E' | M | i \rangle$ , где  $|i\rangle$  — начальное состояние, из которого система переходит.

Рассмотрим теперь состояние

$$|\psi(0)\rangle = N \sum_{E'} |E'\rangle \langle E' | M | i \rangle, \quad (11.8a)$$

где  $N$  — нормировочный множитель. Из (11.8a) сразу вытекает

$$\langle E' | \psi(0)\rangle = N \langle E' | M | i \rangle \quad (11.8б)$$

и, следовательно,

$$\sum_{E'} |\langle E' | \psi(0)\rangle|^2 = \sum_{E'} N^2 |\langle E' | M | i \rangle|^2 = 1. \quad (11.8в)$$



Для любого состояния  $|\xi\rangle$  мы имеем, таким образом, соотношение

$$\langle \xi | M | i \rangle = \sum_{E'} \langle \xi | E' \rangle \langle E' | M | i \rangle = \frac{1}{N} \langle \xi | \psi(0) \rangle. \quad (11.9a)$$

Отсюда, используя (11.8a), сразу получаем

$$\begin{aligned} |\langle \psi(0) | M | i \rangle|^2 &= \left| \sum_{E'} \langle \psi(0) | E' \rangle \langle E' | M | i \rangle \right|^2 = \\ &= N^2 \left\{ \sum_{E'} |\langle E' | M | i \rangle|^2 \right\}^2 = \sum_{E'} |\langle E' | M | i \rangle|^2. \end{aligned} \quad (11.9b)$$

Рассматриваемое состояние  $|\psi(0)\rangle$  вбирает в себя всю силу перехода. Формула (11.9a) показывает, что матричный элемент перехода  $\langle \xi | M | i \rangle$  пропорционален перекрытию состояний  $|\xi\rangle$  и  $|\psi(0)\rangle$ , а формула (11.9b) говорит нам, что квадрат матричного элемента  $\langle \psi(0) | M | i \rangle$  непосредственно связан с полным эффективным сечением перехода (просуммированным по всем состояниям  $E'$ ).

Если в момент  $t = 0$  система находилась в состоянии (11.8a), то в любой момент времени  $t$  она будет находиться в состоянии

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{E'} |E'\rangle \langle E' | \psi(0) \rangle e^{-iE't/\hbar}. \quad (11.10)$$

Средняя энергия и среднеквадратичная ширина состояния (11.10) не зависят от времени, так как

$$\bar{E} = \sum_{E'} E' |\langle E' | \psi(t) \rangle|^2 = \sum_{E'} E' |\langle E' | \psi(0) \rangle|^2, \quad (11.11a)$$

$$\overline{\Delta E^2} = \sum_{E'} (E' - \bar{E})^2 |\langle E' | \psi(t) \rangle|^2 = \sum_{E'} (E' - \bar{E})^2 |\langle E' | \psi(0) \rangle|^2. \quad (11.11b)$$

Состояние (11.10) является решением временного уравнения Шредингера, которое описывает «гигантское резонансное состояние» в момент времени  $t = 0$ . Чтобы найти «время жизни» или «время распада» этого гигантского резонансного состояния, нужно вычислить перекрытие состояния (11.10) с состоянием  $|\psi(0)\rangle$  в каждый момент времени  $t$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(0) \rangle &= \sum_{E'} |\langle E' | \psi(0) \rangle|^2 e^{iE't/\hbar} = e^{i\bar{E}t/\hbar} \sum_{E'} |\langle E' | \psi(0) \rangle|^2 \times \\ &\times \left\{ 1 + i(E' - \bar{E})t/\hbar - \frac{1}{2}(E' - \bar{E})^2 t^2/\hbar^2 + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (11.12a)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(0) \rangle = e^{i\bar{E}t/\hbar} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \overline{(\Delta E)^2} t^2/\hbar^2 + \dots \right\}. \quad (11.12b)$$

Как видим из (11.12б), перекрытие будет порядка единицы для времен  $t$ , малых по сравнению с временем  $\hbar [(\Delta E)^2]^{-1/2}$ , потом оно постепенно начнет уменьшаться и станет очень малым, когда время  $t$  будет порядка указанного времени. Таким образом, время жизни нашего состояния непосредственно связано с энергетической шириной «пакета», как этого и следовало ожидать из соотношения неопределенности.

Предположим, что, используя какие-то приближения, мы нашли гигантское резонансное состояние  $|\psi(0)\rangle$  как приближенное собственное состояние нашего гамильтониана. Согласно обычным стандартам (принятым, например, в теории возмущений), наше состояние является очень плохим приближением к любому отдельно взятому точному собственному состоянию системы. И тем не менее, если это найденное гигантское резонансное состояние использовать для расчета эффективного сечения поглощения фотона, то мы получим пик, расположенный примерно при правильной энергии и имеющий примерно правильную силу (т. е. правильную величину площади под кривой этого пика). Это состояние, конечно, не дает ни формы линии, ни ее тонкой структуры. Но ведь положение пика и его сила — это обычно та информация об эффективном сечении, которую мы можем сравнить с результатами эксперимента, в частности, когда в экспериментах нельзя достичь необходимого разрешения, чтобы обнаружить тонкую структуру линии или определить ее истинную форму. Хорошие данные относительно положения и силы пика могут служить по крайней мере полезным *первым* приближением.

Во многих квантовых многочастичных системах гигантские резонансные возбужденные состояния практически всегда создаются с помощью обычно используемой в настоящее время экспериментальной техники. Процессы поглощения фотона, рассеяния электрона и прямые ядерные реакции очень часто сопровождаются возбуждением системы такую небольшую энергетическую область, в которой имеется континуум энергетических уровней. Каждое возбуждение указанного типа описывается своим простым оператором, часто имеющим вид одночастичного оператора (которым надо подействовать на начальное состояние, чтобы получить рассматриваемое возбужденное состояние). Если описывать нашу систему какой-либо простой одночастичной моделью, например в рамках хартри-фоковского приближения, то можно убедиться, что рассматриваемые возбужденные состояния представляют собой некоторое множество дискретных различных состояний. Хотя, конечно, одночастичное описание системы не может быть очень хорошим, однако не учтенные в нем эффекты могут влиять на рассматриваемые возбужденные состояния только в том случае, когда они будут «перемешивать» указанные дискретные возбужденные состояния с большим количеством соседних состоя-

ний, т. е. будут превращать эти отдельные собственные состояния в гигантские резонансные состояния. В таких случаях одночастичное описание системы может оказаться очень полезным, так как даст правильные положения и силы пиков даже тогда, когда собственные состояния (с которыми оно имеет дело), далеки от точных собственных состояний нашей системы и когда очень плохо учтены межчастичные корреляции (которые, таким образом, никак не влияют на рассматриваемые гигантские резонансы).

Возбуждения, создаваемые в системе каким-либо простым способом и приводящие к возбужденным состояниям, которые приближенно стационарны (т. е. имеют большое время жизни и узкую ширину), иногда называют «элементарными возбуждениями». Изучение этих элементарных возбуждений (теоретическое и экспериментальное) оказалось очень плодотворным при исследовании структуры многочастичных квантовых систем. Многие развитые в настоящее время приближенные методы исследования таких систем нацелены главным образом на изучение свойств элементарных возбуждений, а совсем не на определение точных или просто «хороших» приближенных решений уравнения Шредингера.

### § 3. Пример элементарных возбуждений

Рассмотрим электрическое квадрупольное возбуждение ядра  $^{16}\text{O}$ . Оператор электрического квадрупольного поглощения фотона ядром в длинноволновом пределе в точности совпадает с оператором электрического квадрупольного момента системы, т. е. дается суммой операторов квадрупольных моментов индивидуальных частиц:

$$Q_M = \sum_i r_i^2 Y_M^2(\theta_i, \phi_i); \quad (11.13)$$

здесь  $Y_M^2$  — соответствующие сферические гармоники.

Если описывать ядро  $^{16}\text{O}$  в рамках модели оболочек с гармоническим осцилляторным потенциалом, то его энергетические уровни будут эквидистантными с расстояниями между соседними уровнями, равными  $\hbar\omega$ , причем самые низкие  $s$ - и  $p$ -уровни будут заполнены. Оператор  $Q_M$  является суммой операторных членов, каждый из которых повышает энергию одной из частиц системы на величину  $2\hbar\omega$ , либо перемещая ее с  $s$ -уровня при  $n = 0$  на уровень  $sd$ -оболочки при  $n = 2$ , либо перемещая частицу с  $p$ -уровня при  $n = 1$  на уровень  $pf$ -оболочки при  $n = 3$ . Этот оператор, вообще говоря, имеет ненулевые диагональные матричные элементы и матричные элементы, которые понижают энергию частицы на  $2\hbar\omega$ . Однако все такие матричные элементы обращаются в нуль в частном случае волновой функции основного состояния ядра

$^{16}\text{O}$  в модели оболочек. Таким образом, в рассматриваемом приближении спектр возбуждений, получаемый при электрическом квадрупольном поглощении фотона, должен быть  $\delta$ -образным и сосредоточенным на энергии  $2\hbar\omega$ .

Учтем теперь, что одночастичные уровни гармонического осциллятора расщепляются под влиянием «спин-орбитального» взаимодействия, а также добавочного потенциала, описывающего отклонение потенциала оболочечной модели от чистого гармонического осцилляторного потенциала. Так, например,  $p$ -оболочка расщепится на подоболочки  $p_{3/2}$  и  $p_{1/2}$ ,  $sd$ -оболочка — на подоболочки  $s_{1/2}$ ,  $d_{3/2}$  и  $d_{5/2}$ ,  $pf$ -оболочка — на подоболочки  $p_{1/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $f_{5/2}$  и  $f_{7/2}$ . Таким образом, получаются три дырочных уровня и семь частичных уровней, участвующих в рассматриваемом квадрупольном возбуждении. Из 21 возможной «частично-дырочной» конфигурации, возникающей при квадрупольном возбуждении, 15 можно связать с некоторым числом состояний с полным моментом количества движения, равным 2, и с матричными элементами квадрупольного оператора (11.13), отличными от нуля. Таким образом, если учесть поправки к гармоническим осцилляторным одночастичным уровням ядра  $^{16}\text{O}$ , то при квадрупольном возбуждении его основного состояния должны будут наблюдаться 15 отдельных компонент, а не одна линия.

Учтем теперь эффекты двухчастичного «остаточного» взаимодействия (не включенные в хартри-фоковское приближение). Сначала рассмотрим матричные элементы этого двухчастичного взаимодействия, берущиеся на подпространстве линейных комбинаций возбужденных «одночастично-однодырочных» состояний, обладающих моментом количества движения и четностью  $2^+$ . Для остаточного двухчастичного взаимодействия ненулевыми оказываются недиагональные матричные элементы, которые связывают друг с другом различные одночастично-однодырочные состояния. Лучшие волновые функции мы можем получить, если используем теорию возмущений в случае вырождения и диагонализуем рассматриваемое «остаточное» двухчастичное взаимодействие на подпространстве одночастично-однодырочных состояний. Это несколько сдвинет энергии энергетических уровней и изменит волновые функции, так что произойдет перераспределение значений матричных элементов квадрупольного возбуждения для взятых 15 состояний.

Используем теперь то обстоятельство, что возбуждения с энергией  $2\hbar\omega$  также можно получить (в модели оболочек с гармоническим осцилляторным потенциалом) путем возбуждения не одной, а *двух* частиц, каждую из которых мы можем переместить на соседний уровень, например переместить две частицы из  $p$ -оболочки в  $sd$ -оболочку. Имеется большое число таких «двухчастично-двухдырочных» состояний  $2^+$  (около 100), и все они перемешиваются

с рассмотренными выше одночастично-однодырочными возбужденными состояниями посредством остаточного двухчастичного взаимодействия. Далее, используя теорию возмущений в случае вырождения, можно диагонализировать остаточное двухчастичное взаимодействие на подпространстве линейных комбинаций всех состояний, имеющих энергию возбуждения, равную  $2\hbar\omega$  в простой модели оболочек с гармоническим потенциалом. Получаемые при этом поправки к спектру квадрупольного возбуждения, возникающие в результате указанной диагонализации, будут очень сильно отличаться по характеру от тех, которые дает наша первая диагонализация. Квадрупольный оператор, будучи одночастичным оператором, не имеет отличных от нуля матричных элементов между основным состоянием и двухчастично-двухдырочными состояниями. Вся сила квадрупольного перехода концентрируется, таким образом, только на одночастично-однодырочных состояниях. Следовательно, примешивание посредством остаточного двухчастичного взаимодействия к данному одночастично-однодырочному состоянию некоторого числа двухчастично-двухдырочных состояний может привести только к перераспределению имеющейся силы квадрупольного перехода (в конкретное одночастично-однодырочное состояние) между некоторым числом близко расположенных по энергии уровней, причем полная сила перехода останется при этом прежней. Совсем не так обстояло дело при смешивании одночастично-однодырочных состояний при первой диагонализации; там ни для каких состояний матричный элемент квадрупольного перехода не обращался в нуль, эффекты смешивания могли стать когерентными и сильно изменить величины сил квадрупольных переходов в различные состояния.

Итак, нужно обязательно проводить диагонализацию двухчастичного «остаточного» взаимодействия на подпространстве одночастично-однодырочных состояний, чтобы получить правильную картину спектра квадрупольного возбуждения. Однако эффекты примешивания к данным одночастично-однодырочным состояниям двухчастично-двухдырочных состояний учитывать не нужно. Когда остаточное двухчастичное взаимодействие очень сильное, все наши рассуждения, разумеется, оказываются совершенно непригодными. Вместе с тем следует отметить, что всегда имеется довольно широкая область значений двухчастичного остаточного взаимодействия, для которой примесь двухчастично-двухдырочных состояний к одночастично-однодырочным состояниям имеет заметную величину в точных собственных состояниях гамильтониана, но при этом единственное влияние примесей на спектр квадрупольного возбуждения будет заключаться в расщеплении каждой линии спектра на некоторое число отдельных линий (расположенных по энергии вблизи исходной линии) при неизменной суммарной силе квадрупольного перехода. В экспериментах

с «плохим разрешением» это расщепление наблюдать невозможно, просто будут видны широкие линии.

Рассмотрим теперь влияние «остаточного» взаимодействия на основное состояние. Поскольку гамильтониан при действии на хартри-фоковское основное состояние переводит его в некоторую линейную комбинацию двухчастично-двухдырочных возбужденных состояний и его самого, то более точное приближение к истинному основному состоянию можно получить, примешивая к хартри-фоковскому основному состоянию состояния с возбужденными частично-дырочными парами. (Аналогично более точные *возбужденные* состояния получались при примешивании к ним состояний с дополнительными частично-дырочными парами.) Когда мы интересуемся только спектром, возбуждаемым квадрупольным оператором, многие эффекты от примешивания состояний с дополнительными частично-дырочными парами (к основному и возбужденным состояниям) взаимно гасятся, так как вклады их в основное состояние и в возбужденные состояния одинаковы.

Существует, однако, другое важное влияние «корреляций в основном состоянии» на квадрупольные матричные элементы. Пусть, например, основное состояние имеет малую примесь какого-то состояния, содержащего две возбужденные частично-дырочные пары. Тогда квадрупольный оператор  $A$ , действуя на это примесное состояние, может «девозбудить» одну из указанных пар и привести к волновой функции, идентичной той, которая получается при одночастично-однодырочном возбуждении хартри-фоковского основного состояния. Описываемый эффект корреляций в основном состоянии может оказаться важным, так как он дает такие вклады в матричные элементы перехода, которые *линейны* по возмущению (т. е. имеют первый порядок по взаимодействию).

Теперь ясно видно, какими основными чертами должна обладать приближенная теория квадрупольных элементарных возбуждений. Нам совсем не нужны очень хорошие приближенные волновые функции основного и возбужденного состояний. Если потребуется, мы можем взять более точную волновую функцию возбужденного состояния, полученную при диагонализации первого возбужденного состояния на подпространстве одночастично-однодырочных состояний, но нам не стоит беспокоиться о примесях к возбужденному состоянию состояний, имеющих две и более возбужденные частично-дырочные пары. Процедуру неполного учета примесных состояний иногда называют «аппроксимацией Тамма — Данкова». Нам не нужно также беспокоиться и о примесях состояний более высоких конфигураций с возбужденными частично-дырочными парами к волновой функции основного состояния. Нужно только учитывать возможность того, что квадрупольный оператор может девозбудить одно из этих примесных состояний и перевести его в рассматриваемое возбужденное состоя-

ние. Иногда последнюю процедуру называют «процедурой обработки корреляций в основном состоянии в приближении хаотических фаз».

#### § 4. Операторы, рождающие коллективные и одночастичные возбуждения

Займемся теперь формальной теорией элементарных возбуждений. Предположим, что мы нашли такой оператор  $A$  для данной многочастичной системы, который удовлетворяет уравнению

$$[H, A] |g\rangle = \varepsilon A |g\rangle, \quad (11.14a)$$

где  $|g\rangle$  — точная волновая функция основного состояния нашей системы,  $H$  — ее гамильтониан,  $\varepsilon$  — некоторое число. Из (11.14a) немедленно следует, что состояние  $A |g\rangle$  будет задавать некоторую собственную функцию гамильтониана нашей системы с энергией возбуждения  $\varepsilon$  (отсчитанной от основного состояния), т. е. мы имеем

$$H(A |g\rangle) = (E_g + \varepsilon)(A |g\rangle). \quad (11.14b)$$

Можно сказать, что оператор  $A$  «рождает» возбуждение в нашей системе. Поскольку коммутатор  $[H, A]$  пропорционален производной по времени для гейзенберговского оператора  $A$ , то уравнение (11.14a) можно также рассматривать как гейзенберговское уравнение движения оператора  $A$ . Таким образом, как это часто говорят, *операторы, удовлетворяющие простым уравнениям движения, являются операторами, которые рождают возбуждения в системе.*

Два типичных примера операторов, удовлетворяющих уравнению вида (11.14a), доставляют нам гармонический осциллятор и невзаимодействующий ферми-газ. Для гармонического осциллятора уравнению (11.14a) удовлетворяет оператор рождения состояний осциллятора, а для невзаимодействующего ферми-газа ему удовлетворяет оператор, одновременно рождающий частицу выше сферы Ферми и дырку внутри нее.

Рассмотрим сначала гармонический осциллятор. Гамильтониан, записанный через оператор рождения  $a^\dagger$  и оператор уничтожения  $a$  осцилляторных состояний, имеет вид

$$H_{\text{осцил}} = \frac{1}{2} \hbar \omega (a^\dagger a + a a^\dagger). \quad (11.15a)$$

Отсюда

$$[H_{\text{осцил}}, a^\dagger] = \hbar \omega a^\dagger. \quad (11.15b)$$

Уравнение (11.15b) такое же, как уравнение (11.14a), но более общее. Это операторное уравнение справедливо для всех состояний нашего осциллятора и для всех матричных элементов, а не

только для основного состояния. Из (11.156) следует, что можно построить набор из бесконечного числа равноотстоящих друг от друга уровней энергии, действуя повторно оператором  $a^\dagger$  на основное состояние. Уравнение (11.156) по своему виду типично для «квазибозонных» гармонических колебательных мод, имеющих в многочастичных системах. Часто эти моды называют «фононами». Для многочастичной системы обычно удается найти оператор, который, правда, приближенно удовлетворяет уравнению вида (11.156), так как практически всегда имеются ангармонические эффекты и нужно учитывать связь рассматриваемой моды с остальными степенями свободы.

Для не взаимодействующего ферми-газа гамильтониан имеет вид

$$H_F = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (11.16a)$$

где  $\varepsilon_k$  — одночастичные энергии, причем

$$[H_F, c_k^\dagger c_k] = (\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) (c_k^\dagger c_k). \quad (11.16b)$$

С первого взгляда уравнение (11.16b) представляется совершенно общим, как и уравнение (11.156), так как оно справедливо всегда вне зависимости от того, к какому состоянию его применить. Однако уравнение (11.16b) оказывается нетривиальным только в том частном случае, когда оно действует на такое многочастичное состояние, в котором одночастичное состояние  $k$  занято, а состояние  $k'$  не занято. В противном случае имеем тождество  $0 \equiv 0$ . Отметим также, что оператор  $c_k^\dagger c_k$  переводит указанное состояние в состояние, которое уже не удовлетворяет вышеупомянутому условию, а потому при повторном действии на него оператор  $c_k^\dagger c_k$  дает нуль. Возбуждение, получающееся при этом, называют «одночастичным возбуждением». Оно перемещает одну из частиц нашей системы из состояния  $k$  в другое состояние  $k'$ . Энергия возбуждения при этом в точности равна разности соответствующих одночастичных энергий. Если какая-то частица при возбуждении уже была взята из состояния  $k$ , то мы не можем взять еще раз частицу из этого состояния. Таким образом, рассматриваемое одночастичное возбуждение может быть только однократным, а поэтому оно не приводит к множеству эквидистантно расположенных энергетических уровней, как фононное или бозонное возбуждение.

Промежуточные по характеру возбуждения (между одночастичными и бозонными) также встречаются в многофермионных системах. Рассмотрим, например, модель оболочек с гармоническим осцилляторным потенциалом для ядра  $^{16}\text{O}$ . Пусть  $a_{nh}^\dagger$  означает оператор рождения частицы в оболочке, характеризуемой главным квантовым числом  $n$ , дополнительное квантовое число  $k$



нумерует отдельные состояния в этой оболочке. Пренебрежем спин-орбитальным взаимодействием, а также отклонениями одно-нуклонного потенциала от гармонического потенциала. Тогда все состояния, которые имеют одно и то же  $n$ , будут вырождены и будут обладать энергией  $(n + 3/2) \hbar \omega$ . Уровни  $n = 0$  и  $n = 1$  полностью заполнены в ядре  $^{16}\text{O}$ . Рассмотрим теперь электрические квадрупольные возбуждения (как в § 3 настоящей главы), переводящие частицу из оболочки  $n = 0$  в оболочку  $n = 2$  и из оболочки  $n = 1$  в оболочку  $n = 3$ . Можно сразу выписать уравнения, справедливые для всех значений  $k'$  и  $k''$ :

$$[H_{SM}, a_{2k''}^\dagger a_{0k'}] = 2\hbar\omega (a_{2k''}^\dagger a_{0k'}), \quad (11.17a)$$

$$[H_{SM}, a_{3k''}^\dagger a_{1k'}] = 2\hbar\omega (a_{3k''}^\dagger a_{1k'}), \quad (11.17b)$$

где  $H_{SM}$  — гамильтониан модели оболочек. Всякая линейная комбинация операторов, удовлетворяющих уравнениям (11.17a) и (11.17b), также удовлетворяет этим уравнениям. Таким образом, если мы возьмем комбинацию

$$A \equiv \sum_{k''} C(k'k'') a_{2k''}^\dagger a_{0k'} + \sum_{k''} D(k'k'') a_{3k''}^\dagger a_{1k'}, \quad (11.18a)$$

то для нее получим

$$[H_{SM}, A] = 2\hbar\omega A. \quad (11.18b)$$

Заметим, что электрический квадрупольный оператор (11.13) можно представить в виде (11.18a).

Каждым из операторов, удовлетворяющих уравнениям (11.17), можно подействовать только один раз на данное состояние, так как квадрат каждого такого оператора есть нуль. Вместе с тем кинетической комбинацией  $A$  [определенной (11.18a)] можно действовать по нескольку раз на любое состояние, поскольку  $A^2 \neq 0$ ; таким образом, можно получить некоторое число эквидистантных энергетических уровней, аналогичных уровням гармонического осциллятора. Оператор  $A$  рождает возбуждение, которое является когерентной линейной комбинацией одночастичных возбуждений. Такое возбуждение часто называют «коллективным» возбуждением.

Квадрат каждого отдельного оператора в сумме (11.18), определяющей оператор  $A$ , обращается в нуль. Операторными слагаемыми в операторе  $A^2$ , не обращающимися в нуль, будут поэтому «перекрестные» произведения, в которых никакой оператор не появляется множителем по два или более раз. Рассматривая все более и более высокие степени  $A$ , мы обязательно достигнем того момента, когда показатель степени станет больше числа слагаемых в сумме (11.18a), так что среди этих слагаемых не будет таких, в которых какой-нибудь отдельный оператор рождения

или уничтожения не встретился хотя бы дважды. Эта степень  $A$  должна равняться нулевому оператору. Таким образом, многократно действуя оператором  $A$  на данное состояние системы, мы можем получить спектр эквидистантных энергетических уровней, похожий на спектр гармонического осциллятора, но отличающийся от него тем, что он будет «обрезан» на определенном высоком уровне. Можно сказать, что оператор  $A$  «приближенно» обладает свойствами бозонного оператора рождения, когда имеется большое число слагаемых в сумме (11.18) и когда число элементарных возбуждений в системе мало по сравнению с числом слагаемых в этой сумме.

Уравнение (11.186) довольно тривиально в простейшем случае модели оболочек с гармоническим осцилляторным потенциалом, в которой вырождение уровней настолько велико, что можно составить очень большое число линейных комбинаций, удовлетворяющих этому уравнению. Вырождение одночастичных уровней снимается для физически более реалистичной модели, так как в ней учитывается более реалистичный однонуклонный потенциал, а также остаточное двухчастичное взаимодействие [как, например, в гамильтониане (11.7)]. В этом случае операторы вида (11.18а) все еще полезно рассматривать, если только будет выполнено одно из следующих условий:

1. Может случиться, что определенные (вполне конкретные) линейные комбинации операторов (11.18а) удовлетворяют уравнению (11.186) для более реалистичного гамильтониана, хотя отдельные операторные слагаемые в них и не обращают теперь операторные уравнения (11.17) в тождества. Проблема отыскания таких особых линейных комбинаций математически эквивалентна проблеме отыскания решений уравнения Шредингера, описывающих возбужденные состояния. Эти особые линейные комбинации, удовлетворяющие уравнению (11.186), можно рассматривать как операторы, рождающие возбуждения, которые в свою очередь можно считать или «одночастичными», или «коллективными» в зависимости от того, имеется ли в сумме (11.18а) одно преобладающее над всеми остальными слагаемое или же в ней все слагаемые дают вклады примерно одинаковой величины. К такого рода возбуждениям иногда применяют термин «квазичастичные» возбуждения. Возбуждения одночастичного типа часто называют «квазифермионными», а коллективного типа — «квазибозонными».

2. Может оказаться, что некоторая конкретная линейная комбинация (11.18а) будет рождать реально наблюдаемое физическое возбуждение. Например, для возбуждения ядра при электрическом дипольном или квадрупольном переходе с поглощением фотона соответствующий электрический мультипольный оператор можно представить в виде (11.18а). (Это справедливо в длинноволновом пределе при использовании волновых функций гармони-

ческого осциллятора, как отмечалось в § 3 настоящей главы.) В этом случае, т. е. в случае простого гармонического осцилляторного гамильтониана, рассматриваемый оператор родит одно возбужденное состояние системы, которое «вбирает в себя всю силу перехода». Поскольку мультипольный оператор, действуя на основное состояние, переводит его в собственное состояние гамильтониана, то для любого собственного состояния, ортогонального этому «мультипольному» состоянию, мультипольный матричный элемент, связывающий его с основным состоянием, должен равняться нулю. Для более реалистичного гамильтониана мультипольный оператор не удовлетворяет уравнению (11.186), а следовательно, «мультипольное» состояние не является собственным. Но в таком случае данное состояние может быть такой линейной комбинацией, составленной из многих собственных состояний, которая описывает «гигантское резонансное состояние». Тогда вся сила мультипольного перехода будет заключена в этом гигантском резонансном состоянии, а мультипольный оператор можно будет рассматривать как рождающий «физическое элементарное возбуждение». Правда, может представиться еще одна возможность, когда сила мультипольного перехода распределится между небольшим числом гигантских резонансных состояний, каждое из которых рождается оператором вида (11.186). Мультипольный оператор тогда будет линейной комбинацией этих последних операторов.

Итак, мы можем строить элементарные возбуждения для данной квантовой многочастичной системы, пытаясь для нее найти операторы, приближенно удовлетворяющие простым уравнениям движения вида (11.14а). О законности приближения можно судить только по полученным результатам, представляющим физический интерес. Если, например, окажется, что левая часть уравнения (11.14а) равна сумме правой части и некоторых членов, которыми мы пренебрегаем, то эти члены не обязательно должны быть малыми. Состояние, рождаемое оператором  $A$ , не обязательно будет точным или даже приближенным собственным состоянием: оно может быть и гигантским резонансным состоянием. Таким образом, дополнительные слагаемые в уравнении (11.14а) можно отбрасывать даже в том случае, когда они вовсе и не малые, если, конечно, их роль состоит в преобразовании изучаемого возбужденного состояния в гигантское резонансное состояние (путем приращивания к возбужденному состоянию большого числа соседних состояний без изменения силы соответствующего перехода). Здесь мы имеем один из примеров такого приближения, которое с первого взгляда можно было бы считать очень плохим (если оценивать его по принятым стандартам), но которое оказывается практически очень хорошим для величин, представляющих физический интерес.

### § 5. Линеаризованные уравнения движения и приближение хаотических фаз

Постараемся отыскать элементарные возбуждения, которые могут возбуждаться при поглощении фотона в системе, являющейся одной из двух рассмотренных выше систем (т. е. в электронном газе или ядре  $^{16}\text{O}$ ). При этом мы будем искать такой одночастичный оператор, который удовлетворяет простому уравнению движения, имеющему вид (11.14а), и рождает интересующие нас элементарные возбуждения.

Для обеих рассматриваемых систем гамильтониан имеет следующий общий вид:

$$H = H_1 + H_2, \quad (11.19)$$

где  $H_1$  — одночастичный оператор,  $H_2$  — двухчастичный оператор. Для любого одночастичного оператора  $A$  получаем

$$[H, A] = C_1 + C_2, \quad (11.20а)$$

где

$$C_1 = [H_1, A], \quad (11.20б)$$

$$C_2 = [H_2, A]. \quad (11.20в)$$

Коммутаторы  $C_1$  и  $C_2$  будут одно- и двухчастичными операторами соответственно. Коммутатор (11.20а) не может быть пропорциональным оператору  $A$ , так как оператор  $A$  — одночастичный оператор. Коммутатор (11.20а) является суммой одночастичного  $C_1$  и двухчастичного  $C_2$  операторов. Таким образом, ни один из одночастичных операторов не может строго удовлетворить уравнению (11.14а).

Вместе с тем уравнение вида (11.14а) легко получить из (11.20а), если приближенно пренебречь двухчастичным коммутатором  $C_2$ . Двухчастичный оператор  $C_2$  при действии на волновую функцию основного состояния переводит ее в сумму волновых функций состояний, имеющих по одной или по две возбужденные частицы. Если при этом можно пренебречь появляющимися двухчастичными возбуждениями, то можно будет постараться отыскать такие одночастичные операторы  $A$ , которые в рассматриваемом приближении удовлетворяют в точности уравнению (11.14а). Описанное приближение иногда называют «приближением хаотических фаз».

Если провести рассуждения в формализме вторичного квантования, то можно иначе охарактеризовать это приближение следующим образом. Любой одночастичный оператор является некоторой линейной комбинацией билинейных произведений операторов рождения и уничтожения, т. е. произведений вида  $a_m^\dagger a_n$ . Коммутатор  $C_2$ , будучи двухчастичным оператором, является

линейной комбинацией произведений операторов рождения и уничтожения вида  $a_m^\dagger a_n a_r^\dagger a_s$ , т. е. вида квадратичных произведений двух билинейных произведений операторов рождения и уничтожения. Уравнение движения (11.20а) «нелинейно», так как оно содержит операторное слагаемое  $C_2$ , которое квадратично по операторам, линейным по  $A$ . Это уравнение можно, однако, «линеаризовать», предположив, что операторы  $a_m^\dagger a_n$  при  $m \neq n$  «намного меньше» операторов при  $m = n$ . Данное предположение можно оправдать, обратившись к следующему стандартному аргументу «приближения хаотических фаз». Согласно этому аргументу, в любой сумме, составленной из большого числа операторов вида  $a_m^\dagger a_n$ , операторные слагаемые при  $m \neq n$  некогерентны и складываются со «случайными фазами», а потому при суммировании дают нуль, в то время как каждое из операторных слагаемых с  $m = n$  положительно определено и все они находятся в фазе друг с другом, а потому при суммировании не дают нуля. Конечно, это оправдание рассматриваемого приближения довольно туманно, и нужно сразу подчеркнуть, что строго оправдать данное приближение в рамках общей теории нельзя (так как его законность на самом деле основывается на конкретных особенностях той или иной задачи). В § 6 и 7 настоящей главы покажем, как обстоит дело с двумя нашими конкретными системами, которые мы здесь все время рассматриваем.

Если мы воспользуемся вышеуказанным приближением и сохраним в  $C_2$  только операторные слагаемые вида  $a_m^\dagger a_n a_r^\dagger a_s$ , для которых равны друг другу какие-либо два индекса, то мы тем самым сможем преобразовать оператор  $C_2$  в оператор, который будет одночастичным. Таким образом, мы как бы «линеаризуем» наше уравнение движения, просто отбрасывая в нем операторные члены второго порядка по «малым» операторам  $a_m^\dagger a_n$  с  $m \neq n$ .

Можно указать еще одну причину, по которой мы должны пренебречь двухчастичными возбуждениями в  $C_2$ . Она состоит в следующем. Двухчастичные возбужденные состояния системы нельзя достичь, исходя из основного состояния и повторно действуя на него оператором, рождающим рассматриваемые элементарные возбуждения. Включение в рассмотрение таких состояний неминуемо потребовало бы включить в оператор, удовлетворяющий уравнению (11.14а), наряду с одночастичным также и двухчастичные вклады, а поэтому вообще трех-, четырех- и многочастичные вклады. Даже если эти вклады в точном решении уравнения (11.14а) не малы, они все равно не могут заметным образом изменить матричный элемент перехода для нашего элементарного возбуждения. В этом случае возбужденное состояние, получаемое при решении *линеаризованных* уравнений движения, будет гигантским резонансным состоянием, «вбирающим в себя всю силу

возбуждения» данного энергетического интервала, и не будет связано с одним каким-то отдельным состоянием.

Аргументы, приведенные выше для оправдания пренебрежения двухчастичными вкладками в  $C_2$ , конечно, до конца не убедительны. Они позволяют только почувствовать, почему обсуждаемое приближение действительно оказывается пригодным в ряде случаев. Разумеется, законность его должна особо исследоваться в каждой данной конкретной задаче.

Следует отметить в заключение, что термин «одночастичное возбуждение» мы использовали выше довольно нечетко. Конечно, если основное состояние является чистым одночастичным состоянием, то для него легко указать все те состояния, которые получаются путем возбуждения в нем одной частицы. Но если основное состояние не такое или вообще нам не известно, то становится трудным придать смысл словам «та составляющая двухчастичного оператора, которая возбуждает только одну частицу». Выше мы формально определили одночастичную составляющую двухчастичного оператора, *неявно предположив, что основное состояние является чистым одночастичным состоянием*. Конечно, это может показаться читателю непоследовательным, особенно если он будет иметь в виду те случаи, когда учет отклонений истинного основного состояния от одночастичного состояния приводит к большим поправкам в окончательных результатах; к обсуждению данного вопроса мы еще вернемся позже.

## § 6. Приближение хаотических фаз для электронного газа

Найдем теперь решения линеаризованных уравнений движения для электронного газа (просто чтобы показать, как их решать). Мы выпишем и решим эти уравнения, нисколько не заботясь об оправдании используемого приближения.

Гамильтониан нам удобно записать в следующем виде:

$$H = \sum_{k\sigma} \frac{(\hbar k)^2}{2m} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} v_k (\rho_{-k} \rho_k - n); \quad (11.21)$$

мы выразили его через фурье-компоненты электронной плотности  $\rho_k$ , определенные в (11.6).

Для любого одночастичного оператора  $A$  коммутатор  $[H, A]$  есть сумма одночастичной и двухчастичной составляющих [см. (11.20)]. Двухчастичная составляющая для гамильтониана (11.21) равна

$$C_2 = \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} v_k (\rho_{-k} [\rho_k, A] + [\rho_{-k}, A] \rho_k). \quad (11.22)$$

Поскольку  $\rho_k$  — одночастичный оператор, коммутатор  $C_2$  можно линеаризовать, сохранив в нем только *диагональные* части коммутаторов  $[\rho_{\pm k}, A]$ . Их надо умножить в (11.22) на одночастичные операторы  $\rho_{\pm k}$ , причем в результате получатся одночастичные операторы, в то время как остальные части коммутаторов  $[\rho_{\pm k}, A]$  возбуждают одну частицу и приводят к двухчастичным возбуждениям после умножения их на  $\rho_{\pm k}$ . (Заметьте, что мы пренебрегаем теми членами, в которых каждый из двух множителей возбуждает по одной частице, однако в результате все равно получаются одночастичные возбуждения, потому что второй множитель переводит частицу на место дырки, образованной при первом возбуждении.) Иногда такие члены называют «обменными»; они возникают только для систем тождественных частиц. Если бы две частицы, которым отвечают переменные  $r_i$  и  $r_j$  в (11.4), не были тождественными, указанные члены не приводили бы к одночастичным возбуждениям, а соответствовали бы одночастичному возбуждению и перестановке двух частиц.

Возьмем в качестве оператора  $A$  одночастичный оператор самого общего вида, лишь бы он рождал возбуждение с заданным импульсом  $\hbar k'$  и не изменял ориентации спина частицы:

$$A_{k'} = \sum_{q\sigma'} g_{k'q'} c_{k'+q'}^\dagger \sigma' c_{q'\sigma'}. \quad (11.23)$$

Здесь  $g_{k'q'}$  — некоторые коэффициенты, которые надо определить, чтобы (11.23) было решением линеаризованных уравнений. Коммутатор  $[\rho_k, A_{k'}]$  можно представить в следующем виде:

$$[\rho_k, A_{k'}] = \sum_{qq'\sigma\sigma'} g_{k'q'} [c_{q\sigma}^\dagger c_{k+q, \sigma}, c_{k'+q'}^\dagger \sigma' c_{q'\sigma'}]. \quad (11.24)$$

Диагональные матричные элементы этого коммутатора определяются только теми операторными слагаемыми в (11.24), для которых  $q = q'$ ,  $\sigma = \sigma'$ ,  $k = k'$ , так что

$$\langle [\rho_k, A_{k'}] \rangle = \delta_{kk'} \sum_{q'\sigma'} g_{k'q'} (n_{q'\sigma'} - n_{k'+q', \sigma'}), \quad (11.25a)$$

$$= \delta_{kk'} \sum_{q'\sigma'} (g_{k'q'} - g_{k', q'-k'}) n_{q'\sigma'}, \quad (11.25b)$$

где  $n_{q'\sigma'}$  — операторы чисел частиц, находящихся в разных состояниях. Мы получили (11.25b) из (11.25a), изменив индекс суммирования  $q'$  во второй сумме.

Оба слагаемых в коммутаторе (11.22), как легко видеть, дают равные друг другу вклады в диагональную часть оператора  $C_2$ , так как суммирование в (11.22) ведется по всем индексам  $k$  (второе

слагаемое получается из первого заменой  $k$  на  $-k$ ). Линеаризованные уравнения движения, таким образом, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} [H, A_{k'}] &= \sum_{q'\sigma'} \left( \frac{\hbar^2 (k' + q')^2}{2m} - \frac{\hbar^2 q'^2}{2m} \right) g_{k'q'} c_{k'+q', \sigma'}^\dagger c_{q'\sigma'} + \\ &+ v_k c_{k'+q', \sigma'}^\dagger c_{q'\sigma'} \sum_{q''\sigma''} (g_{k'q''} - g_{k', q''-k'}) n_{q''\sigma''} = \\ &= \hbar\omega_{k'} \sum_{q'\sigma'} g_{k'q'} c_{k'+q', \sigma'}^\dagger c_{q'\sigma'}, \end{aligned} \quad (11.26)$$

где  $\hbar\omega_{k'}$  — энергия возбуждения отыскиваемого элементарного возбуждения.

Коэффициенты, стоящие перед операторами  $c_{k'+q', \sigma'}^\dagger c_{q'\sigma'}$  в правой и левой частях второго равенства в (11.26), можно приравнять друг другу, так как эти операторы для различных  $q'$  линейно независимы. В результате получаем

$$\left( \hbar\omega_{k'} - \frac{\hbar^2 (k' + q')^2}{2m} + \frac{\hbar^2 q'^2}{2m} \right) g_{k'q'} = v_k \sum_{q''\sigma''} (g_{k'q''} - g_{k', q''-k'}) n_{q''\sigma''}, \quad (11.27)$$

т. е. систему зацепленных однородных линейных уравнений для определения коэффициентов  $g_{k'q'}$ .

Числа заполнения  $n_{q''\sigma''}$  мы возьмем относящимися к невозмущенному основному состоянию. Следовательно, их можно заменить на единицу при условии, что суммирование в (11.27) будет вестись только по состояниям, расположенным внутри сферы Ферми. Отметим, что при действии на такое основное состояние единственными слагаемыми в (11.23), приводящими к ненулевому результату, будут те, для которых  $q'$  лежит внутри сферы Ферми, а  $k' + q'$  — вне ее. Если для коэффициента  $g_{k'q'}$  импульсы  $k'$ ,  $q'$  удовлетворяют этому критерию, то для коэффициента  $g_{k', q''-k'}$  импульсы  $k'$ ,  $q'' - k'$  не будут ему удовлетворять, так как импульс  $k' + (q'' - k') = q'$  лежит внутри сферы Ферми. Таким образом, могло бы показаться, что второе слагаемое в сумме в правой части (11.27) можно вообще отбросить [поскольку оно получается от тех членов в (11.23), которые дают нуль при действии на невозмущенное основное состояние]. Конечно, так рассуждать нельзя, так как эти члены могут и не давать нуля, когда они действуют на истинное основное состояние, а потому их надо сохранить. И, действительно, ниже мы увидим, что важно учитывать эти слагаемые в (11.27). Здесь, конечно, есть непоследовательность. Когда мы определили выше, что понимаем под «одночастичной частью ком-



мутатора», мы брали волновую функцию невозмущенного основного состояния. Вместе с тем мы не считаем ее истинной волновой функцией.

Вследствие исключительно простого вида системы однородных уравнений (11.27) ее можно легко разрешить, не проводя вычисления огромного детерминанта. Используя (11.27), искомое  $g_{k',q'}$  можно выразить через сумму, стоящую в правой части (11.27), а затем это выражение для  $g$  можно подставить в саму сумму. Так мы получим

$$\sum_{|q'| < k_F} (g_{k',q'} - g_{k',q'-k'}) = \sum_{|q'| < k_F} \left( \frac{v_{k'}}{\hbar\omega_{k'} - \frac{\hbar^2(k'+q')^2}{2m} + \frac{\hbar^2q'^2}{2m}} - \frac{v_{k'}}{\hbar\omega_{k'} - \frac{\hbar^2q'^2}{2m} + \frac{\hbar^2(q'-k')^2}{2m}} \right) \sum_{|q''| < k_F} (g_{k',q''} - g_{k',q''-k'}), \quad (11.28a)$$

а следовательно,

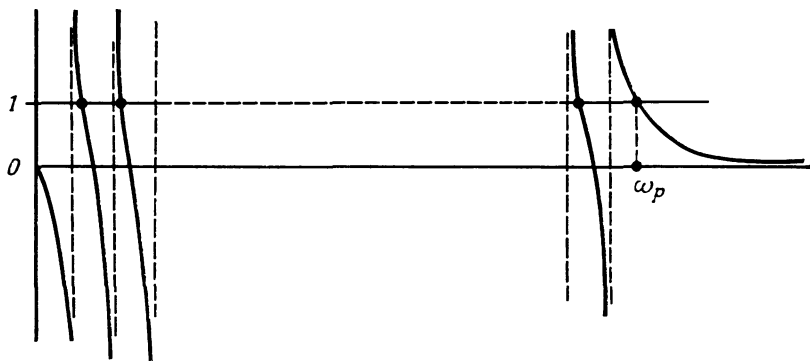
$$1 = \sum_{q'} \left( \frac{v_{k'}}{\hbar\omega_{k'} - \frac{\hbar^2(k'+q')^2}{2m} + \frac{\hbar^2q^2}{2m}} - \frac{v_{k'}}{\hbar\omega_{k'} - \frac{\hbar^2q'^2}{2m} + \frac{\hbar^2(q'-k')^2}{2m}} \right) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{m} \sum_{q'} \left( \frac{1}{\hbar\omega_{k'} - \frac{\hbar^2 k' \cdot q'}{m} - \frac{\hbar^4 k'^4}{4m^2}} \right). \quad (11.28б)$$

В уравнении (11.28б) единственным неизвестным является  $\omega_{k'}$ . Уравнение (11.28б) так или иначе можно разрешить; в результате получим возможные значения энергий возбуждения. Оно позволяет найти частоту  $\omega_{k'}$  как функцию волнового числа  $k'$ . Уравнение (11.28б) часто называют «дисперсионным соотношением Бома—Пайнса».

Общие свойства решений уравнения (11.28б) можно легко понять, если прибегнуть к следующему рассуждению. Правая часть уравнения (11.28б) обязательно обращается в бесконечность всякий раз, когда один из знаменателей в каком-либо члене суммы обращается в нуль. Это случается, если  $\hbar\omega_{k'}$  равно какой-либо невозмущенной энергии возбуждения, т. е. той энергии, которую необходимо затратить, чтобы переместить в невзаимодействующем электронном газе частицу из какого-то состояния  $q'$  в состояние  $q' + k'$ . Кривая зависимости правой части (11.28б) от  $\omega_{k'}$  изображена на фиг. 11.2.

Согласно уравнению (11.28б), его правая часть при величинах  $\hbar\omega_{k'}$ , являющихся решениями, обращается в единицу, т. е. все

решения должны соответствовать точкам, в которых кривая (11.286) пересекает прямую, параллельную оси абсцисс и имеющую ординату, равную единице. Так как наша кривая идет от  $+\infty$  до  $-\infty$ , на любом участке между парой соседних невозмущенных энергий возбуждения обязательно имеется одно значение энергии возбуждения взаимодействующего электронного газа. Из системы уравнений (11.27) видно, что, когда величина  $\hbar\omega_k$  близко подходит к невозмущенной энергии возбуждения, соответствующей одночастичному переходу из состояния  $q'$  в состояние  $q' + k'$ , тогда коэффициент  $g_{k'q'}$  принимает значение, намного большее значений



Фиг. 11.2.

остальных коэффициентов  $g$ . Таким образом, мы имеем дело с *одночастичным* возбуждением, так как в (11.23) имеется одно слагаемое, доминирующее над всеми остальными.

Из фиг. 11.2 мы видим, кроме того, что существует также и особое решение (для значения  $\hbar\omega_k$ , лежащего выше максимальной энергии одночастичных возбуждений). Это решение  $\hbar\omega_k$  можно получить, заменяя в (11.286) сумму просто на интеграл и вычисляя его. Поскольку  $\hbar\omega_k$  лежит выше всех невозмущенных энергий возбуждений, то этот интеграл не будет иметь никаких особенностей. Уравнение (11.286) тогда легко разрешить приближенно при малых  $k'$ , так как в сумме можно будет пренебречь членами, содержащими малые  $k'$ . Эта сумма при  $k' \rightarrow 0$  оказывается равной  $n/(\hbar\omega_k)^2$ , где  $n$  — полное число частиц в электронном газе, и мы получаем

$$\omega_k^2 = \frac{4\pi e^2}{m} \frac{n}{\Omega}. \quad (11.29)$$

Эта формула дает в точности классическую плазменную частоту. Соответствующие возбуждения называются «плазмонами» или «плазменными волнами». Они представляют флуктуацию плотно-

сти с волновым числом, равным  $k'$ . Обратите внимание на то, что плазменная частота зависит от  $n/\Omega$ , т. е. от *плотности* частиц, а не отдельно от числа частиц  $n$  и от объема системы  $\Omega$ .

Легко показать, что оператор  $A_{k'}$ , рождающий плазменное возбуждение, по существу является фурье-компонентой плотности  $\rho_{k'}$ . При  $k' \rightarrow 0$  членами, содержащими  $q'$  в левой части уравнения (11.27), можно пренебречь по сравнению с  $\hbar\omega_{k'}$ ; коэффициенты  $g_{k'q'}$  перестают зависеть от  $q'$  в пределе  $k' \rightarrow 0$ . Формула (11.23) тогда дает

$$\lim_{k' \rightarrow 0} A_{k'} = \rho_{k'} \tag{11.30}$$

[не стоит проявлять беспокойства по поводу того, что сумма в правой части (11.27) обращается в нуль при  $k' \rightarrow 0$ , когда  $g_{k'q'}$  становятся независимыми от  $k'$ , так как эта сумма умножается на множитель  $1/k'^2$ , имеющийся в  $v_{k'}$ ]. Таким образом, плазменное возбуждение действительно приближенно является флуктуацией плотности с волновым числом  $k'$ . Обратите внимание, что единственное, что нам потребовалось при получении этого результата от волновой функции основного состояния — ее числа заполнения  $n_{q'\sigma'}$ . Поскольку возбуждение одной частично-дырочной пары изменяет только два числа заполнения, то легко видеть, что вид оператора  $A_{k'}$ , рождающего плазменную моду или плазменную частоту  $\omega_{k'}$ , не может существенно измениться, если вначале у нас было не чистое невозмущенное основное состояние, а в нем было возбуждено некоторое число частично-дырочных пар и некоторое число плазмонов. Таким образом, операторы  $A_{k'}$ , рождающие плазмоны, должны приближенно вести себя как бозонные операторы рождения, а потому можно будет возбуждать по несколько плазмонов.

Очевидным следствием описанной картины волн плотности в электронном газе, приближенно ведущих себя как гармонические осцилляторы, должно быть заключение, что существуют «нулевые» плазменные колебания в истинном основном состоянии взаимодействующего электронного газа. Они проявятся в том, что в истинной волновой функции основного состояния появятся примеси состояний, в которых возбуждено бесконечно большое число частично-дырочных пар. Учет таких корреляций в основном состоянии может дать заметный вклад в энергию основного состояния, и их обязательно нужно рассматривать при исследовании расходимостей, появляющихся в теории возмущений, берущей в качестве исходного состояния невозмущенную сферу Ферми.

Из теории, в которой нулевые флуктуации плотности электронов принимаются во внимание при изучении свойств основного состояния, следует, что их роль сводится к экранированию «даль-

нодействующей» части кулоновского взаимодействия, целиком ответственной за упомянутые расходимости; после учета нулевых колебаний плотности остается только «заэкранированное» взаимодействие между электронами, которое не приводит уже ни к каким расходимостям при *малых*  $k'$  (т. е. на далеких расстояниях). Эта теория, однако, выходит за рамки данной книги. Здесь мы ограничимся только тем, что поясним ее смысл. Это хорошо иллюстрируется следующим «физическим» рассуждением. Мы обязательно должны ожидать неприятностей при расчете кулоновской энергии взаимодействия частиц в электронном газе при предположении, что все частицы движутся независимо друг от друга и что между ними нет никаких корреляций. Пусть, например, один какой-то электрон сдвинулся на очень малое расстояние из своего начального положения. Тогда изменение электрического потенциала, действующего на остальные электроны со стороны данного электрона, равно потенциалу соответствующего электрического диполя (надо поместить «положительный» электрон в точку начального положения нашего электрона и «отрицательный» электрон в точку, в которую он сдвинулся). Потенциал диполя убывает как  $1/r^2$  с увеличением расстояния от него. Число же электронов электронного газа, имеющих в сферическом слое заданного радиуса  $r$ , возрастает как  $r^3$ . Таким образом, рассматриваемое изменение кулоновской энергии взаимодействия с данным электроном всех электронов, лежащих внутри сферического слоя радиусом  $r$  и толщиной  $dr$ , не зависит от  $r$ . Изменение кулоновской энергии всех электронов внутри сферы радиусом  $r$  пропорционально  $r$ , т. е. становится бесконечным, когда  $r$  обращается в бесконечность. Полученная бесконечность, разумеется, физически бессмысленна, так как мы не учли, что электроны могут свободно передвигаться. С макроскопической точки зрения на электроны можно смотреть просто как на некоторый электрический заряд в проводнике. Перемещение зарядов внутри проводника никак не может повлиять на распределение электрического поля вне проводника, так как всегда будет сопровождаться соответствующим перемещением свободного заряда в проводнике, которое заэкранирует внешнюю область проводника от заряда, расположенного внутри его. Если учесть, что перемещение рассматриваемого электрона должно вызывать перемещения всех остальных электронов, которые заэкранируют изменения электрического поля на больших расстояниях, то наша бесконечность в кулоновской энергии сразу исчезнет. Перемещение электронов, обеспечивающее экранировку, очевидно, незначительно меняется с расстоянием, и поэтому можно считать, что оно образует волновой пакет из флуктуаций плотности электронов очень больших длин волн. Описанный тип электронных корреляций — это именно те корреляции, которые учитываются, когда в теорию электронного газа вводятся плазмоны; эти корреляции

никак не принимаются во внимание в хартри-фоковском приближении.

Хотя полное пренебрежение корреляциями частиц в основном состоянии приводит к появлению расходимостей в обычной теории возмущений, однако можно надеяться, что отсутствие учета их в линеаризованных уравнениях движения (11.26) не приведет к серьезным ошибкам. Эффекты этих корреляций были нами фактически учтены, когда мы взяли такое определение операторов  $A_k$  [см. (11.23)], согласно которому они включали члены, обращающиеся в нуль, если не было указанных корреляций (т. е. операторные члены, уничтожающие по одной частице в состоянии выше сферы Ферми и рождающие по одной частице в состоянии внутри ее). При этом мы не стали принимать во внимание правильную форму волновой функции основного состояния взаимодействующего электронного газа. Специфические свойства этой волновой функции мы учли, введя в уравнение (11.27) числа заполнения  $n_{q\sigma}$ , определенные для нее. Поскольку в случае плазмонного возбуждения в сумму (11.27) вклад дает очень большое число состояний  $q$ , то окончательно получаемые результаты практически не чувствительны к изменениям, связанным со сравнительно небольшим числом чисел заполнения частиц. Таким образом, истинная волновая функция основного состояния может очень сильно отличаться от невозмущенной волновой функции в смысле теории возмущений, и в то же время это не приведет к существенным сдвигам собственных частот  $\omega_k$  при переходе от невозмущенной волновой функции к истинной в (11.27), т. е. когда в (11.27) мы подставим вместо невозмущенных правильные числа заполнения.

### § 7. Гигантские резонансные состояния ядра $^{16}\text{O}$

Рассмотрим теперь аналогичным образом ядро  $^{16}\text{O}$ . В этом случае наша «ферми-сфера» состоит из первых низкорасположенных  $s$ - и  $p$ -оболочек, и мы будем рассматривать здесь только возбуждения, получаемые путем перевода частицы из  $p$ -оболочки ( $n = 1$ ) в соседнюю оболочку, т. е.  $sd$ -оболочку ( $n = 2$ ). Поскольку у нас нет теперь собственных функций импульса, а есть собственные функции момента количества движения и четности, мы будем говорить о разных *мультипольных* возбуждениях, а не о возбуждениях «с заданными волновыми числами».

Возьмем, например, электрическое дипольное возбуждение основного состояния ядра  $^{16}\text{O}$ , которое является возбужденным состоянием с моментом количества движения, равным единице, и с нечетной четностью. Для его описания мы можем составить наиболее общую линейную комбинацию операторов, которые рождают состояния  $1^-$ , а затем отыскать коэффициенты из того условия, что линейная комбинация удовлетворяет линеаризованному урав-

нениям движения. Эта процедура практически в точности такая же, как использованная в § 6 настоящей главы в случае электронного газа, однако имеются следующие отличия:

1. Так как моменты количества движения складываются просто как импульсы, то наиболее простой формой оператора, рождающего в не взаимодействующей системе требуемое возбуждение, не будет произведение одного оператора рождения и одного оператора уничтожения, а будет линейная комбинация таких произведений операторов, взятая с соответствующими коэффициентами Клебша — Гордона.

2. Число частиц в системе теперь небольшое. Фактически у нас даже не 16, а только 12 частиц (четыре частицы, расположенные на внутренней  $s$ -оболочке, вообще учитывать не нужно).

Прежде чем заниматься решением соответствующих линеаризованных уравнений движения, представим, что мы получим, если к данной задаче для ядра  $^{16}\text{O}$  применим обычную теорию возмущений. Невозмущенное основное состояние системы не вырождено, но первые возбужденные состояния  $1^-$  квазивырождены, так как все они получаются путем перемещения одной частицы из  $p$ -оболочки в  $sd$ -оболочку, а энергии этих оболочек очень близки. Первый этап в обычной теории возмущений — избавиться от этого квазивырождения путем диагонализации взаимодействия в подпространстве квазивырожденных состояний. Второй этап — провести вычисления во втором порядке, т. е. учесть вклады в энергию от всех тех состояний, которые связаны с основными ненулевыми матричными элементами оператора взаимодействия (иначе говоря примешиваются к основному состоянию в первом порядке по взаимодействию). Поскольку наше взаимодействие двухчастичное, это означает, что к основному состоянию в первом порядке примешиваются возбужденные состояния с двумя частично-дырочными парами, а к любому возбужденному состоянию — возбужденные состояния с тремя частично-дырочными парами.

Если теперь мы выпишем линеаризованные уравнения движения для самой общей линейной комбинации частично-дырочных операторов, которые являются произведениями операторов рождения и уничтожения одночастичных состояний в оболочках  $n = 1$  и  $n = 2$ , то найдем, что эти операторы могут быть двух типов: *первые* — которые переводят частицу из  $p$ -оболочки в  $sd$ -оболочку, и *вторые* — которые переводят частицу из  $sd$ -оболочки в  $p$ -оболочку. (Операторы этих двух типов соответствуют операторам двух типов, имеющимся для электронного газа: первые — тем, которые перемещают частицу из состояния внутри сферы Ферми в состояние, расположенное вне сферы Ферми, и вторые — тем, которые переводят частицу из состояния вне сферы Ферми в состояние внутри ее.) Очевидно, операторы *второго* типа обращаются в нуль, когда они действуют на невозмущенную волновую функцию основ-

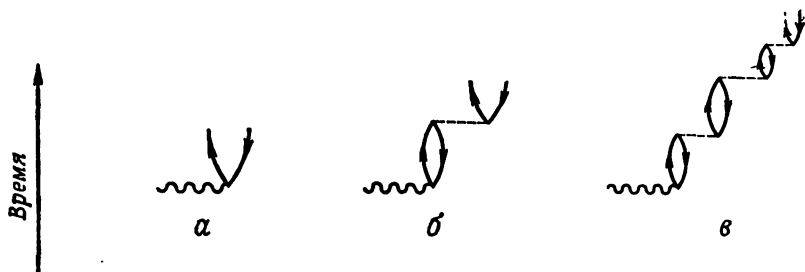
ного состояния, как в случае электронного газа, так и в случае ядра  $^{16}\text{O}$ . Операторы второго типа связаны с «корреляциями в основном состоянии», и их вклады оказываются важными, когда истинное основное состояние заметно отличается от невозмущенного основного состояния.

Если рассмотреть только операторы первого типа, возбуждающие частицу из  $p$ -оболочки в  $sd$ -оболочку, то мы сможем легко убедиться, что линеаризованные уравнения движения окажутся в этом случае в точности эквивалентными уравнениям стандартной теории возмущений, основанной на модели оболочек. Действительно, пытаюсь отыскать наиболее общие операторы, рождающие возбуждения  $1^-$  путем рождения одной частицы в  $sd$ -оболочке и уничтожения одной частицы в  $p$ -оболочке, мы приходим в точности к тем невозмущенным возбужденным состояниям, которые возникают в теории возмущений при диагонализации оператора взаимодействия. В приближении линеаризованных уравнений движения мы рассматриваем результат действия нашего гамильтониана на указанные волновые функции и сохраняем только те члены, которые имеют по одной возбужденной частице в  $sd$ -оболочке и по одной дырке в  $p$ -оболочке, а затем решаем получающуюся систему однородных алгебраических уравнений. Эта процедура математически эквивалентна процедуре диагонализации гамильтониана в подпространстве состояний, имеющих одну возбужденную частицу в  $sd$ -оболочке и одну дырку в  $p$ -оболочке. Таким образом, в простейшем, нулевом приближении обычная теория возмущений, основанная на модели оболочек, и процедура линеаризации уравнений движения (или приближение хаотических фаз) совершенно эквивалентны. Такое приближение, позволяющее «пероткрыть» стандартную модель оболочек с помощью простого алгебраического метода, часто называют «приближением Тамма — Данкова».

Если мы включим в рассмотрение также и операторы второго типа, то должны будем учесть возможность, что некоторое число возбужденных частично-дырочных пар примешается к нашему основному состоянию, а также что и в возбужденных состояниях будет иметься некоторое число частично-дырочных пар. Здесь, однако, мы уже не связаны тем условием, согласно которому в основном состоянии имеются обязательно две возбужденные частично-дырочные пары, а в каждом возбужденном — по три, как в промежуточных состояниях во втором порядке теории возмущений. Таким образом, процедура учета корреляций в основном состоянии в приближении хаотических фаз *не соответствует* приближению обычной теории возмущений. В этой процедуре учитываются некоторые вклады второго порядка, хотя и не все, а также определенные вклады третьего, четвертого и более высоких порядков. Совсем неясно, какое приближение лучше — прибли-

жение хаотических фаз или обычная теория возмущений. Чтобы ответить на этот вопрос, необходимо рассмотреть каждую конкретную задачу в отдельности.

Чтобы лучше представить себе разные вклады, учитываемые и не учитываемые в различных приближениях, обычно сопоставляют им диаграммы. На фиг. 11.3, *а* показан процесс возбуждения частично-дырочной пары налетающим фотоном. Волнистая линия изображает фотон. Линия со стрелкой, направленной вверх (идущая по времени), изображает частицу. Линия со стрелкой, направ-



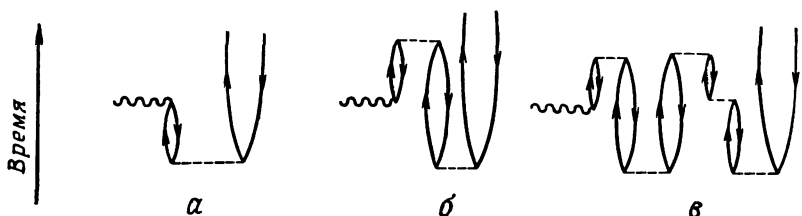
Фиг. 11.3.

ленной вниз (идущая против времени), изображает дырку. На фиг. 11.3, *б* показан процесс, в котором частично-дырочная пара была создана фотоном, а затем аннигилировала с образованием другой частично-дырочной пары в результате действия двухчастичного взаимодействия, изображенного пунктирной линией. На фиг. 11.3, *в* показаны процессы с повторными рождениями и уничтожениями частично-дырочных пар. Диагонализация гамильтониана в модели оболочек в «одночастично-однодырочном подпространстве» соответствует на диаграммах суммированию всевозможных диаграмм всех порядков до бесконечности типа изображенной на фиг. 11.3, *в*. Это потому, что диагонализация учитывает все взаимодействия, связывающие между собой состояния, в каждом из которых имеется только по одной частично-дырочной паре. Указанные диаграммы иногда называют «прямыми» диаграммами с неразрывными комплексами «частица — дырка».

Диаграмма на фиг. 11.4, *а* изображает типичный вклад, который дают «корреляции в основном состоянии». До рождения фотона имелись две частично-дырочные пары, которые образовались в результате действия двухчастичного взаимодействия. Затем налетающий фотон поглотился, и одновременно одна из пар аннигилировала, т. е. фотон был поглощен частицей, первоначально находившейся в возбужденном состоянии и которая спустилась из него вниз и заполнила дырку. На фиг. 11.4, *б* показана другая диаграмма для учета корреляций в основном состоянии. На ней изображен процесс, когда первоначально имелись две пары, а фотон



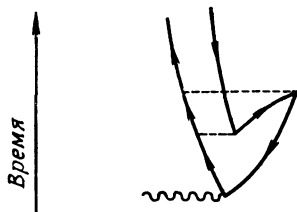
был поглощен с образованием новой, третьей пары, которая потом аннигилировала с одной из первоначальных пар. Такие как бы сложенные гармошкой диаграммы, т. е. прямые диаграммы с неразрывными комплексами «частица — дырка», и диаграммы, получаемые из них всевозможными перегибаниями, характерны для



Фиг. 11.4.

приближения хаотических фаз. Типичная диаграмма этого приближения более сложного вида показана на фиг. 11.4, в.

На фиг. 11.5 показана диаграмма, которая не является диаграммой с неразрывным комплексом «частица — дырка» и вклад от которой не учитывается в приближении хаотических фаз, это диаграмма второго порядка; взаимодействие в ней появляется дважды, и оно приводит к примешиванию в возбужденном состоянии составляющей, имеющей две частично-дырочные пары. В обоих взаимодействиях на диаграмме (см. фиг. 11.5) частицы рассеиваются: один раз с образованием, а другой — с аннигиляцией частично-дырочной пары. К каждой линии взаимодействия прикреплены *три* частичные линии (стрелки направлены вверх) и одна дырочная линия (стрелка направлена вниз), а не по две частичные и по две дырочные линии, как на прежних диаграммах. Таким образом, взаимодействия на фиг. 11.5 нельзя описывать просто как взаимодействия частично-дырочных пар, а потому эта диаграмма и не включена в приближение хаотических фаз.



Фиг. 11.5.

Опишем теперь, как конкретно строить решение в приближении хаотических фаз. Сначала мы должны найти полную систему линейно независимых операторов, которые рождают частично-дырочные возбуждения с данным моментом количества движения и четностью, скажем возбуждения  $1^-$ . Эти операторы уничтожают частицу в оболочке  $n = 1$  и рождают частицу в оболочке  $n = 2$ .

Данные операторы имеют вид

$$C_i = \sum_{k'k''} C_i(k', k'') a_{2k''}^\dagger a_{1k'}. \quad (11.31a)$$

Эрмитово сопряженные операторы к ним можно записать следующим образом:

$$C_i^\dagger = \sum_{k'k''} C_i^*(k', k'') a_{1k'}^\dagger a_{2k''}; \quad (11.31б)$$

каждый из операторов (11.31б) рождает одну частицу в оболочке  $n = 1$  и уничтожает одну частицу в оболочке  $n = 2$ . При действии операторов  $C_i$  [даваемых (11.31а)] на невозмущенное основное состояние мы получаем как раз те возбужденные состояния, которые возникают при диагонализации в обычной теории возмущений модели оболочек. Операторы  $C_i^\dagger$  [даваемые (11.31б)] переводят невозмущенное основное состояние в нуль. Они нужны для учета «корреляций в основном состоянии».

Линеаризованные уравнения движения для операторов (11.31а) и (11.31б) имеют следующий вид:

$$[H, C_i]_{\text{линеар}} = \sum_j a_{ji} C_j + \sum_j b_{ji}^* C_j^\dagger, \quad (11.32a)$$

$$[H, C_i^\dagger]_{\text{линеар}} = - \sum_j a_{ji}^* C_j^\dagger - \sum_j b_{ji} C_j; \quad (11.32б)$$

здесь  $a_{ji}$  и  $b_{ji}$  — некоторые коэффициенты; уравнение (11.32б) получается из (11.32а) эрмитовым сопряжением. Чтобы найти оператор, удовлетворяющий уравнению, которому должен удовлетворять оператор, рождающий возбуждение [см. (11.14а)], необходимо подставить в уравнение (11.14а) наиболее общую линейную комбинацию, составленную из операторов (11.31а) и (11.31б):

$$C = \sum_i x_i C_i - \sum_i y_i C_i^\dagger; \quad (11.33)$$

здесь перед вторым слагаемым мы поставили минус для того, чтобы получить окончательный результат в том же виде, как он обычно приводится в литературе.

Подставляя (11.33) в линеаризованное уравнение (11.14а), а также используя формулы (11.32а) и (11.32б) для линеаризованных коммутаторов, мы получаем следующую формулу:

$$\begin{aligned} \sum_{ij} x_i a_{ji} C_j + \sum_{ij} x_i b_{ji}^* C_j^\dagger + \sum_{ij} y_i a_{ji}^* C_j^\dagger + \sum_{ij} y_i b_{ji} C_j = \\ = \varepsilon \sum_i (x_i C_i - y_i C_i^\dagger). \end{aligned} \quad (11.34)$$

Приравнявая друг другу коэффициенты при каждом из линейно независимых операторов  $C_i$  и  $C_i^\dagger$  в правой и левой частях форму-

лы (11.34), получаем систему однородных линейных уравнений для определения коэффициентов  $x_i$  и  $y_i$  и собственного значения  $\varepsilon$ . Эти уравнения можно записать в компактном виде, если представить коэффициенты  $a_{ji}$  и  $b_{ji}$  матрицами  $A$  и  $B$ , а коэффициенты  $x_i$  и  $y_i$  матрицами  $X$  и  $Y$ :

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix}, \quad (11.35a)$$

$$\begin{pmatrix} A & -B \\ B^* & -A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} X \\ -Y \end{pmatrix}. \quad (11.35b)$$

Таким образом, мы свели проблему отыскания элементарных возбуждений к проблеме диагонализации *неэрмитовой* матрицы, порядок которой удвоен по сравнению с порядком матрицы  $A$ . Последняя матрица, очевидно, является в точности той матрицей, которую нужно было бы диагонализировать, если мы предположили, что в формуле (11.34) можно учесть только часть, дающую ненулевой результат при действии на невозмущенное основное состояние, т. е. если бы мы отбросили в ней все члены, содержащие операторы  $C_j^\dagger$ . Мы видим, что учет корреляций в основном состоянии в приближении хаотических фаз требует диагонализации матрицы удвоенного размера по сравнению с той матрицей, которую нужно диагонализировать в обычной теории возмущений, основанной на модели оболочек.

### § 8. Временная версия приближения Хартри — Фока

Пренебрежение в приближении хаотических фаз операторными слагаемыми, имеющимися в  $C_2$  (они возбуждают по две частицы в хартри-фоковском основном состоянии), совсем в духе самого хартри-фоковского приближения, в котором также пренебрегается двухчастичными возбуждениями. И действительно, эти два приближения тесно связаны между собой. Оказывается, приближение хаотических фаз можно просто рассматривать как временную версию хартри-фоковского приближения, в котором состояния многочастичной системы описывают как состояния движения независимых частиц в некотором зависящем от времени потенциале.

Как построить временное обобщение хартри-фоковской теории, можно показать на простом примере гармонического осциллятора (11.15). Рассмотрим оператор

$$S = a^\dagger e^{-i\omega t} + a e^{i\omega t}. \quad (11.36a)$$

Тогда, если  $\psi(t)$  будет решением временного уравнения Шредингера для гармонического осциллятора, то, как это непосредственно видно из уравнения движения (11.156), функция  $e^{i\alpha S}\psi(t)$  тоже будет решением этого временного уравнения Шредингера, т. е.

$$H_{\text{осцилл}} e^{i\alpha S}\psi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{i\alpha S}\psi(t)]; \quad (11.366)$$

здесь  $\alpha$  означает любую постоянную. Если  $\alpha$  велико, а  $\psi(t)$  — функция основного состояния гармонического осциллятора, то движение, описываемое функцией  $e^{i\alpha S}\psi(t)$ , будет классическим гармоническим колебанием с частотой  $\omega$ , т. е. эта функция будет волновым пакетом, построенным из собственных функций гамильтониана нашего осциллятора.

Поскольку при получении этого результата мы использовали только уравнения движения (11.156) и не ссылались ни на какие другие свойства нашего осциллятора, то мы должны заключить, что наш окончательный результат должен остаться справедливым и для любого квазибозонного возбуждения, рождаемого таким оператором  $A^\dagger$ , который удовлетворяет уравнению движения (11.156). Это уравнение, однако, составляется для другой системы с другим гамильтонианом. Таким образом, мы всегда можем рассмотреть эрмитов оператор  $S$ , связанный с элементарными возбуждениями данного типа, а также построить соответствующее ему решение  $e^{i\alpha S}\psi(t)$  временного уравнения Шредингера (11.366), которое описывает периодически колеблющуюся волновую функцию около волновой функции основного состояния.

Предположим теперь, что волновая функция  $\psi(t)$  является хартри-фокковской волновой функцией, а оператор  $A^\dagger$  — одночастичным оператором. Тогда оператор  $S$  тоже будет одночастичным, и мы можем написать

$$e^{i\alpha S} |X\Phi\rangle = e^{i\alpha S} \prod_k c_k^\dagger |0\rangle = \prod_k [e^{i\alpha S} c_k^\dagger e^{-i\alpha S}] |0\rangle; \quad (11.37)$$

здесь  $c_k^\dagger$  — оператор рождения частицы в состоянии  $k$  хартри-фокковского базиса одночастичных состояний. Как непосредственно видно из (11.37), состояние  $e^{i\alpha S} |X\Phi\rangle$  можно представить как результат действия произведения некоторых операторов рождения одночастичных состояний на вакуумное состояние. При этом, однако, мы должны иметь дело с новым базисом одночастичных состояний, который получается из хартри-фокковского базиса в результате действия *зависящего от времени* унитарного преобразования.

Так как одночастичные состояния хартри-фокковского базиса являются решениями одночастичного уравнения Шредингера для самосогласованного потенциала, преобразованные одночастичные состояния, входящие в (11.37), будут решениями некоторого преоб-

разованного уравнения, гамильтониан которого получается из исходного гамильтониана в результате соответствующего зависящего от времени унитарного преобразования. Поскольку оператор  $S$  — периодическая функция времени, то определяемый при описанном преобразовании одночастичный потенциал будет периодически колебаться около хартри-фоковского потенциала. Это «временное хартри-фоковское приближение» оказывается исключительно полезным для описания мультипольных колебаний ядер. Например, если  $A^\dagger$  — оператор квадрупольного элементарного возбуждения, то временной хартри-фоковский потенциал будет совершать квадрупольные колебания около своей равновесной формы, т. е. он будет описывать некоторую коллективную моду деформационного движения ядра, при которой частицы ядра движутся в периодически изменяющемся со временем потенциале, а сам этот потенциал как раз является средним полем, которое создается частицами.

Подробное изложение теории временного хартри-фоковского приближения можно найти в литературе. Она здесь не рассматривается, так как выходит за рамки данной книги. Основная идея теории, однако, очень проста и состоит в нахождении приближенного решения *временного* уравнения Шредингера, имеющего вид (11.37), т. е. в нем волновая хартри-фоковская функция обобщается и строится из одночастичных состояний, которые периодически изменяются с течением времени.

### § 9. Правила сумм

Элементарные возбуждения, которыми мы здесь занимаемся, часто удовлетворяют важным соотношениям, называемым «правилами сумм». Например, легко убедиться в самом общем случае, что сумма квадратов матричных элементов переходов из основного состояния в возбужденные состояния для любого оператора  $M$  удовлетворяет правилу сумм

$$\begin{aligned} \sum_{E'} |\langle g | M | E' \rangle|^2 &= \sum_{E'} \langle g | M | E' \rangle \langle E' | M^\dagger | g \rangle = \\ &= \langle g | M^2 | g \rangle - |\langle g | M | g \rangle|^2, \end{aligned} \quad (11.38)$$

где  $|g\rangle$  — истинное основное состояние, а сумма берется по всем возбужденным состояниям  $|E'\rangle$  рассматриваемой системы.

«Правило сумм с энергетическими весами» легко получить, коммутируя оператор  $M$  с гамильтонианом. Рассмотрим, например, одночастичный оператор  $M$ , который зависит только от координат частиц и не зависит от их импульсов, спинов и т. д. Такими

операторами являются, скажем, операторы электрических мультиполей

$$M = \sum_i M_i(x_i). \quad (11.39)$$

Если гамильтониан является суммой оператора кинетической энергии и оператора, зависящего от координат, но не зависящего от импульсов, то мы легко можем получить следующие выражения для коммутаторов:

$$[H, [M_i]] = \left[ \frac{p_i^2}{2m}, M_i \right] = -i\hbar [p_i M_i' + M_i' p_i] / 2m. \quad (11.40a)$$

$$[[H, M_i], M_j^\dagger] = -2\hbar^2 |M_i'|^2 \delta_{ij} / m. \quad (11.40b)$$

Беря матричный элемент от (11.40b) по основному состоянию и выписывая в явном виде полные суммы по промежуточным состояниям, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{E'} \{ \langle g | [H, M_i] | E' \rangle \langle E' | M_j^\dagger | g \rangle - \langle g | M_j^\dagger | E' \rangle \langle E' | [H, M_i] | g \rangle \} = \\ = -2 \sum_{E'} (E' - E_g) \langle g | M_i | E' \rangle \langle E' | M_j^\dagger | g \rangle = \\ = -2\hbar^2 \langle g | |M_i'|^2 | g \rangle \delta_{ij} / m. \end{aligned} \quad (11.41a)$$

Отсюда, суммируя по  $i$  и  $j$ , окончательно имеем

$$\sum_{E'} (E' - E_g) | \langle g | M | E' \rangle |^2 = \hbar^2 \langle g | \sum_i |M_i'|^2 | g \rangle / m. \quad (11.41b)$$

Это правило сумм с энергетическими весами связывает матричные элементы возбуждений для оператора  $M$  со средним значением некоторой функции от координат по основному состоянию. Для электрического дипольного возбуждения оператор  $M_i$  пропорционален  $x_i$ , а поэтому  $M_i'$  будет постоянной. Следовательно, в правой части рассматриваемого правила сумм мы будем иметь просто некоторую постоянную. Для электрического квадрупольного возбуждения наше правило сумм связывает матричные элементы возбуждения с электрическим квадрупольным моментом основного состояния ядра и среднеквадратичным радиусом ядра.

Правила сумм были выведены в квантовой механике в свое время и затем стали широко использоваться (и используются в настоящее время) практически во всех областях теоретической квантовой физики, начиная с атомной спектроскопии и кончая физикой элементарных частиц. Два вышеприведенных правила

сумм (11.39) и (11.416) очень типичны. Квадраты матричных элементов оператора, рождающего элементарные возбуждения, суммируются сами или с весовыми множителями по всем возможным возбужденным состояниям, и при этом получается величина, которая в принципе может быть измерена экспериментально (при условии, что на эксперименте действительно достигаются все соответствующие возбужденные состояния). Суммы, которые входят в исходные правила сумм, часто преобразуют с привлечением чисто алгебраических свойств рассматриваемых операторов к виду сумм от произведений матричных элементов, берущихся по всем возможным промежуточным состояниям. Эти преобразованные суммы затем удается вычислить с использованием условия полноты, и так в правило сумм вводится еще одна экспериментально наблюдаемая величина.

Подчеркнем, что при выводе правил сумм не делается никаких предположений о виде волновой функции основного состояния и мало что требуется от свойств гамильтониана. При выводе правила сумм (11.38) вообще не нужно было использовать никаких свойств гамильтониана, а при выводе правила сумм (11.416) необходимо было предположить только, чтобы удовлетворялись коммутационные соотношения (11.40а). Именно по этой причине рассматриваемые правила сумм очень полезны при исследовании структуры систем, свойства которых нам полностью не известны либо по теоретическим, либо по экспериментальным причинам.

В ядерной физике правило сумм типа (11.416) можно использовать для проверки коммутационного соотношения (11.40а). При этом мы можем ничего не знать о гамильтониане ядра или о его волновых функциях. Если окажется, что правило сумм не подтверждается экспериментом, то мы должны сделать заключение, что гамильтониан содержит, кроме членов кинетической энергии, также и другие члены, которые не коммутируют с координатами частиц, т. е. что в гамильтониане имеются либо зависимости от скоростей взаимодействия, либо же обменные взаимодействия.

В физике элементарных частиц правила сумм получают, делая вполне определенные предположения о виде коммутационных соотношений операторов, представляющих электромагнитный и слабый токи, с гамильтонианом. Такие операторы рождают элементарные возбуждения в системах с сильным взаимодействием, которые возбуждаются в них налетающими фотонами или нейтрино. Соответствующая область теории элементарных частиц называется «алгеброй токов». Она привела к ряду удивительных результатов. Полученное согласие теории с экспериментом свидетельствует о правильности предположения о виде основных коммутационных соотношений, хотя в данной области нам практически вообще ничего не известно ни о волновых функциях, ни о динамических переменных элементарных частиц.

### § 10. Временная теория элементарных возбуждений

Было предложено много красивых математических методов для исследования элементарных возбуждений в квантовомеханических многочастичных системах, не требующих детальных знаний их волновых функций. Многие из методов первоначально были разработаны в квантовой теории поля. Они выглядят намного проще, когда применяются к изучению элементарных возбуждений в нерелятивистских многочастичных системах. Некоторыми из них мы уже пользовались выше в теории эффекта Мессбауэра в гл. 2.

Рассмотрим эффективное сечение какого-либо процесса, связанного с определенным элементарным возбуждением, и будем интересоваться зависимостью этого эффективного сечения от энергии элементарного возбуждения. Пусть этот процесс описывается оператором  $M$ . Тогда его эффективное сечение можно записать в виде

$$\sigma(E) dE = K(E) \sum_{E'} | \langle g | M | E' \rangle |^2 \delta(E - E') dE; \quad (11.42)$$

здесь  $K(E)$  — некоторый «кинематический» множитель. Поскольку спектр энергетических уровней системы мы предполагаем дискретным, то спектр энергий элементарных возбуждений в (11.42) будет описываться суммой  $\delta$ -функций, сосредоточенных на энергиях  $E'$  соответствующих элементарных возбуждений нашей системы, причем каждая  $\delta$ -функция будет входить с весом, пропорциональным квадрату соответствующего матричного элемента оператора  $M$ .

Правую часть формулы (11.42) можно теперь преобразовать следующим образом. Прежде всего запишем входящую в формулу  $\delta$ -функцию в виде интеграла Фурье и получим

$$\sigma(E) dE = \frac{K(E) dE}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \sum_{E'} \langle g | M | E' \rangle e^{i(E-E')\tau/\hbar} \langle E' | M^\dagger | g \rangle. \quad (11.43a)$$

Поскольку  $E'$  является собственным значением гамильтониана для состояния  $|E'\rangle$ , а  $E_g$  — собственным значением для состояния  $|g\rangle$ , то имеем

$$\begin{aligned} \sigma(E) dE = \\ = \frac{K(E) dE}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E_g)\tau/\hbar} \sum_{E'} \langle g | e^{iH\tau/\hbar} M e^{-iH\tau/\hbar} | E' \rangle \langle E' | M^\dagger | g \rangle. \end{aligned} \quad (11.43b)$$



Следовательно,

$$\begin{aligned} \sigma(E) dE &= \frac{K(E) dE}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E_g)\tau/\hbar} \langle g | e^{iH\tau/\hbar} M e^{-iH\tau/\hbar} M^\dagger | g \rangle = \\ &= \frac{K(E) dE}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E_g)\tau/\hbar} \langle g | M(\tau) M^\dagger(0) | g \rangle. \end{aligned} \quad (11.43в)$$

Здесь  $M(\tau)$  — гейзенберговский оператор, соответствующий оператору  $M$ , взятый в момент времени  $\tau$ . Фурье-образ спектра энергий элементарных возбуждений мы выразили, таким образом, через матричный элемент от произведения гейзенберговских операторов, взятых в разные моменты времени.

Хотя временная переменная в приведенном выводе появилась несколько искусственно (просто в результате некоторого математического преобразования), однако временная зависимость наших величин имеет простой физический смысл, а именно она связана с временной эволюцией гигантских резонансных состояний нашей системы, которые мы уже обсуждали в § 2 настоящей главы. Действительно, формулу (11.12б) для амплитуды вероятности распада гигантского резонансного состояния можно преобразовать к виду формулы (11.43в), так как

$$\begin{aligned} \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle &= \sum_{E'} | \langle E' | \psi(0) \rangle |^2 e^{-iEt/\hbar} = \\ &= N^2 \sum_{E'} \langle g | M | E' \rangle \langle E' | M^\dagger | g \rangle e^{-iE't/\hbar}, \end{aligned} \quad (11.44а)$$

$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = N^2 e^{-iE_g t/\hbar} \langle g | M(t) M^\dagger(0) | g \rangle. \quad (11.44б)$$

Физический смысл формул (11.43) и (11.44) совершенно ясен. Существуют два взаимодополняющих способа описания спектра энергий элементарных возбуждений, рождаемых при действии оператора  $M^\dagger$  на состояние  $|g\rangle$ , а именно с использованием энергетической или временной переменной соответственно. Амплитуда распада состояния  $M^\dagger |g\rangle$ , получаемого при возбуждении, которая рассматривается как функция времени, пропорциональна фурье-образу функции спектра энергий элементарных возбуждений.

Элементарные возбуждения, берущиеся в пределах малой энергетической области с конечной шириной, можно описывать как одно состояние, распадающееся с некоторым конечным временем жизни. Их часто называют поэтому «квазичастичными» возбуждениями, так как они «ведут себя почти как частицы». В пределе, когда время жизни оказывается бесконечным, а ширина — нулевой, можно считать, что оператор  $M^\dagger$  является оператором рождения частицы, которую, таким образом, мы добавляем к нашей

системе. В случае электрических дипольного или квадрупольного возбуждений этот оператор рождает линейную комбинацию частично-дырочных пар. В приближении Хартри — Фока отдельная частично-дырочная пара является стабильным (устойчивым) возбуждением многочастичной системы, которое можно интерпретировать как получаемое при добавлении к нашей системе двух квазичастиц. Когерентная линейная комбинация таких частично-дырочных пар ведет себя как бозон, описывающий коллективное элементарное возбуждение нашей многочастичной системы, которое надо рассматривать как колебание всей системы в целом вполне определенного вида. Это элементарное возбуждение с бесконечным временем жизни и нулевой шириной можно интерпретировать как получаемое при добавлении некоторой физической бозонной частицы к нашей многочастичной системе. Элементарное возбуждение, обладающее конечным временем жизни и конечной шириной, описывает затухающее во времени колебание нашей многочастичной системы и представляется квазичастицей с конечным временем жизни.

Во многих случаях шириной и временем распада квазичастичного элементарного возбуждения можно пренебречь, а состояние  $M^{\dagger} | g \rangle$  можно считать собственным состоянием гамильтониана. Это приводит к тому, что в спектре энергий элементарных возбуждений пики конечной ширины надо будет заменить на  $\delta$ -функции. Такое приближение может быть очень полезным, так как оно позволяет делать теоретические предсказания о свойствах элементарных возбуждений, которые потом можно проверять на экспериментах.

### § 11. Спектральные функции и функции Грина

Элементарные возбуждения, рождаемые операторами рождения и уничтожения отдельных частиц, действующими на данное состояние, особенно интересны в теории элементарных возбуждений. Эти элементарные возбуждения непосредственно экспериментально наблюдаются в ядерных реакциях срыва и захвата, в которых к ядру добавляется или от него отнимается одна частица. Кроме того, многие элементарные возбуждения, интересные с экспериментальной точки зрения, можно просто скомбинировать из указанных простых элементарных возбуждений.

В хартри-фоковском приближении оператор  $c_k^{\dagger}$ , рождающий частицу в состоянии, лежащем выше уровня Ферми, рождает элементарное возбуждение «частичного» типа, энергия которого в точности равна соответствующей одночастичной энергии. Этот оператор удовлетворяет уравнению движения

$$[H, c_k^{\dagger}] = \epsilon_k c_k^{\dagger}, \quad k > k_F, \quad (11.45a)$$

где  $k$  означает полный набор квантовых чисел, однозначно характеризующих хартри-фоковское состояние; неравенство  $k > k_F$  надо понимать в том смысле, что состояние  $k$  расположено выше уровня Ферми. Аналогичным образом оператор уничтожения частицы в занятом состоянии, расположенном ниже уровня Ферми, рождает элементарное возбуждение «дырочного» типа, и он удовлетворяет уравнению

$$[H, c_k] = \varepsilon_k c_k, \quad k < k_F, \quad (11.456)$$

где  $\varepsilon_k$  — энергия дырочного состояния

Из уравнений движения (11.45а) и (11.456) можно также легко получить само хартри-фоковское приближение. Если коммутаторы, стоящие в левых частях этих уравнений, вычислить, используя выражение для гамильтониана, то они будут содержать, помимо членов, линейных по операторам рождения и уничтожения, также и члены более высокого порядка, происходящие от двухчастичного взаимодействия. Прилагая к этим уравнениям стандартную процедуру линеаризации, мы приходим в точности к уравнениям Хартри — Фока.

В хартри-фоковском приближении спектр энергий элементарных возбуждений, рождаемых операторами (11.45), тривиален и состоит из единственной  $\delta$ -функции, сосредоточенной на соответствующей энергии. В более высоком, чем хартри-фоковское, приближении, в котором учитывается «остаточное» взаимодействие между частицами, получается более сложный спектр энергий возбуждений. В этом случае удобно рассмотреть следующую функцию, аналогичную функции (11.42):

$$\rho^+(k, \omega) = \sum_{E'} |\langle E' | c_k^\dagger | g \rangle|^2 \delta(\omega + E_g + \mu - E'). \quad (11.46a)$$

Здесь нулевой уровень отсчета энергии для переменной  $\omega$  выбран с таким расчетом, чтобы сделать величину  $\omega$  равной энергии возбуждения. Поскольку у нас нет элементарных возбуждений с отрицательными энергиями, отсчитанными от энергии основного состояния, то

$$\rho^+(k, \omega) = 0 \quad \text{при} \quad \omega < 0. \quad (11.466)$$

Химический потенциал  $\mu$  введен потому, что оператор  $c_k^\dagger$  изменяет число частиц в системе. Состояние  $|E'\rangle$  имеет  $n + 1$  частицу, если состояние  $|g\rangle$  имеет  $n$  частиц. Химический потенциал  $\mu$  — это разность энергий основных состояний  $(n + 1)$ - и  $n$ -частичных систем, т. е.

$$\mu = E_g^{n+1} - E_g^n. \quad (11.47)$$

Таким образом,  $E_g + \mu$  — энергия основного состояния  $(n + 1)$ -частичной системы, а потому аргумент  $\delta$ -функции в (11.46а) обращается в нуль, когда переменная  $\omega$  становится равной энергии возбуждения состояния  $|E'\rangle$ , расположенного выше основного состояния  $(n + 1)$ -частичной системы.

Интегрируя (11.46а) по всем возможным значениям  $\omega$ , получаем правило сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho^{\bullet}(k, \omega) d\omega = \sum_{E'} \langle g | c_k | E' \rangle \langle E' | c_k^{\dagger} | g \rangle = \langle g | c_k c_k^{\dagger} | g \rangle = 1 - \langle g | n_k | g \rangle, \quad (11.48)$$

где  $n_k$  — оператор числа частиц, находящихся в состоянии  $k$ . В хартри-фоковском приближении число  $n_k$  равно 1 или 0 в зависимости от того, занято или не занято рассматриваемое одночастичное состояние  $k$ . При учете взаимодействия основное состояние больше не будет являться собственным состоянием операторов  $n_k$ , и это скажется на виде правила сумм (11.48). Аналогично для цырочных возбуждений можно рассмотреть функцию

$$\rho^{-}(k, \omega) = \sum_{E'} |\langle E' | c_k | g \rangle|^2 \delta(-\omega + E_g - \mu - E'). \quad (11.49a)$$

Для этой функции мы ввели переменную  $\omega$  так, чтобы она была равна отрицательным энергиям возбуждения, отсчитываемым от энергии  $E_g - \mu$  основного состояния  $(n - 1)$ -частичной системы, т. е.

$$\rho^{-}(k, \omega) = 0 \quad \text{при} \quad \omega > 0. \quad (11.49b)$$

Функция (11.49а) удовлетворяет правилу сумм

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \rho^{-}(k, \omega) d\omega &= \sum_{E'} \langle g | c_k^{\dagger} | E' \rangle \langle E' | c_k | g \rangle = \\ &= \langle g | c_k^{\dagger} c_k | g \rangle = \langle g | n_k | g \rangle. \end{aligned} \quad (11.50)$$

Из (11.48) и (11.50) непосредственно видно, что очень удобно ввести в рассмотрение функцию

$$A(k, \omega) = \rho^{+}(k, \omega) + \rho^{-}(k, \omega), \quad (11.51a)$$

которая удовлетворяет простому правилу сумм

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(k, \omega) d\omega = 1. \quad (11.51b)$$

Функцию  $A(k, \omega)$  называют «спектральной весовой функцией» или просто «спектральной функцией». Она описывает возбужде-

ния одновременно как частичного типа (11.46), так и дырочного типа (11.49), причем всегда можно легко разделить в ней эти компоненты. Действительно, так как  $\rho^+(k, \omega) = 0$  при отрицательных  $\omega$ , а  $\rho^-(k, \omega) = 0$  при положительных  $\omega$ , то функция  $A(k, \omega)$  описывает частичные возбуждения при положительных частотах и дырочные возбуждения при отрицательных частотах. Обратите внимание на то, что хотя каждое правило сумм для функций  $\rho^+$  и  $\rho^-$  зависит от свойств основного состояния многочастичной системы, однако правило сумм для спектральной весовой функции  $A(k, \omega)$  совершенно не зависит от вида функции основного состояния.

В приближении Хартри — Фока только одна из функций  $\rho^+$  или  $\rho^-$  может быть отличной от нуля для каждого заданного значения  $k$  (в соответствии с тем, лежит ли  $k$  выше или внутри поверхности Ферми). Наоборот, для взаимодействующей системы энергетические состояния с обеих сторон поверхности Ферми частично заняты. Поэтому оба оператора  $c_k^\dagger$  и  $c_k$  при действии на основное состояние взаимодействующей многофермионной системы не дают нуля. Функции  $\rho^+$ ,  $\rho^-$  и  $A$  можно также выразить через соответствующие гейзенберговские операторы, используя прием, с помощью которого мы получили формулу (11.43) из формулы (11.42):

$$\rho^+(k, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega+\mu)\tau/\hbar} \langle g | c_k(\tau) c_k^\dagger(0) | g \rangle, \quad (11.52a)$$

$$\rho^-(k, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{-i(\omega+\mu)\tau/\hbar} \langle g | c_k^\dagger(\tau) c_k(0) | g \rangle. \quad (11.52b)$$

Формулу (11.52b) можно записать в точности в виде формулы (11.52a), если заменить переменную  $\tau$  на  $-\tau$  и использовать соотношение

$$\langle g | c_k^\dagger(\tau) c_k(0) | g \rangle = \langle g | c_k^\dagger(0) c_k(-\tau) | g \rangle. \quad (11.52в)$$

Таким образом, получаем

$$\rho^-(k, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega+\mu)\tau/\hbar} \langle g | c_k^\dagger(0) c_k(\tau) | g \rangle \quad (11.52г)$$

и, следовательно,

$$A(k, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega+\mu)\tau/\hbar} \langle g | \{c_k(\tau), c_k^\dagger(0)\}_+ | g \rangle. \quad (11.52д)$$

Спектральная весовая функция  $A(k, \omega)$  удовлетворяет простому правилу сумм, но она на самом деле является очень сингулярной, так как составлена из большого числа  $\delta$ -функций. Вся информация о спектре энергий элементарных возбуждений, содержащаяся в  $A(k, \omega)$ , заключена также в менее сингулярной функции — функции Грина, которая определяется следующим образом:

$$G(k, E) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A(k, \omega) d\omega e^{iE\delta}}{E - \omega - \mu + i\omega\delta} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{[\rho^+(k, \omega) + \rho^-(k, \omega)] d\omega e^{iE\delta}}{E - \omega - \mu + i\omega\delta}; \quad (11.53)$$

здесь  $\delta$  — положительное бесконечно малое число. Функция Грина имеет полюсы при всех тех значениях энергии, которые соответствуют энергиям элементарных возбуждений, причем вычеты в этих полюсах пропорциональны силам возбуждений, характеризуемым функцией  $A(k, \omega)$ . Следовательно, единственными сингулярностями функции Грина являются полюсы, что позволяет использовать для ее изучения методы теории функций комплексного переменного, которые неприменимы для функции  $A(k, \omega)$ .

Фурье-образ функции (11.53) по энергетической переменной дается формулой

$$\begin{aligned} G(k, \tau) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE\tau/\hbar} G(k, E) dE = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{[\rho^+(k, \omega) + \rho^-(k, \omega)]}{E - \omega - \mu - i\omega\delta} e^{-iE(\tau - \delta)/\hbar}. \end{aligned} \quad (11.54)$$

Интеграл по  $E$  можно вычислить, замыкая контур бесконечно большой полуокружностью, расположенной в верхней или в нижней полуплоскости в зависимости от знака переменной  $\tau$ . Подынтегральное выражение имеет простой полюс в верхней или в нижней полуплоскости в зависимости от знака  $\omega$ . При  $\tau \leq 0$  контур следует замкнуть в верхней полуплоскости, и мы получим нуль, если подынтегральное выражение имеет полюс, лежащий тоже в верхней полуплоскости, т. е. при отрицательных значениях переменной  $\omega$ . Поскольку  $\rho^+(k, \omega) = 0$  при отрицательных  $\omega$ , то получаем

$$\begin{aligned} G(k, \tau) &= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho^-(k, \omega) e^{-i(\omega + \mu)\tau/\hbar} = \\ &= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau'}{2\pi} e^{i(\omega + \mu)(\tau - \tau')/\hbar} \langle g | c_k^\dagger(0) c_k(\tau) | g \rangle \text{ при } \tau \leq 0. \end{aligned} \quad (11.55a)$$

Здесь мы отбросили бесконечно малое  $\delta$  и использовали формулу (11.52б). Аналогично рассуждая, при  $\tau > 0$  мы замкнем контур в нижней полуплоскости и учтем вклад от полюса при положительных значениях  $\omega$ , а также то, что  $\rho^-$  обращается в нуль. Таким образом, получаем

$$G(k, \tau) = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho^+(k, \omega) e^{-i(\omega+\mu)\tau/\hbar} =$$

$$= -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau'}{2\pi} e^{i(\omega+\mu)(\tau-\tau')/\hbar} \langle g | c_k(\tau) c_k^\dagger(0) | g \rangle \text{ при } \tau > 0.$$

(11.55б)

Интегрирование по  $\tau'$  и  $\omega$  в (11.55а) и (11.55б) очень легко провести, при этом получаются формулы

$$G(k, \tau) = i \langle g | c_k^\dagger(0) c_k(\tau) | g \rangle \text{ при } \tau \leq 0, \quad (11.56а)$$

$$G(k, \tau) = -i \langle g | c_k(\tau) c_k^\dagger(0) | g \rangle \text{ при } \tau > 0. \quad (11.56б)$$

Обе эти формулы можно скомбинировать в одну, если воспользоваться  $\theta$ -функцией, формально определяемой следующим образом:

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 1 & \text{при } \tau > 0, \\ 0 & \text{при } \tau \leq 0. \end{cases} \quad (11.57а)$$

Тогда вместо (11.56а) и (11.56б) получим формулу

$$G(k, \tau) = -i \langle g | c_k(\tau) c_k^\dagger(0) | g \rangle \theta(\tau) + i \langle g | c_k^\dagger(0) c_k(\tau) | g \rangle [1 - \theta(\tau)].$$

(11.57б)

Эту формулу можно записать также по-другому, используя общепринятое обозначение:

$$G(k, \tau) = -i \langle g | T \{ c_k(\tau) c_k^\dagger(0) \} | g \rangle. \quad (11.57в)$$

Входящий сюда символ  $T$  называется символом «временного упорядочивания»; он переставляет операторы, стоящие под его знаком (в случае необходимости), так, чтобы они шли в хронологическом порядке, при котором оператор с более ранним временем располагается правее оператора с более поздним временем. Причем надо учитывать появление знака минус при каждой перестановке антикоммутирующих друг с другом операторов, которые надо производить при переходе к хронологическому порядку операторов в произведении.

Когда базис одночастичных состояний  $k$  является базисом плоских волн, мы можем рассмотреть также фурье-образ функции Грина в конфигурационном пространстве

$$G(k, \tau) = \int e^{-ik \cdot r} G(r, \tau) d^3 r; \quad (11.58)$$

здесь функцию Грина  $G(r, \tau)$  можно выразить через операторы рождения и уничтожения частиц в конфигурационном пространстве

$$\psi(r, \tau) = \sum_k c_k(\tau) e^{ik \cdot r}, \quad (11.59a)$$

$$\psi^\dagger(r, \tau) = \sum_k c_k^\dagger(\tau) e^{ik \cdot r}. \quad (11.59b)$$

в результате получим

$$G(r, \tau) = -i \langle g | T \{ \psi(r, \tau) \psi^\dagger(0, 0) \} | g \rangle. \quad (11.59b)$$

Эту последнюю формулу часто записывают в более общем виде, выбирая произвольным образом начало отсчета пространственных и временной координат, т. е. в виде

$$G(r_1 t_1; r_2 t_2) = -i \langle g | T \{ \psi(r_1, t_1) \psi^\dagger(r_2, t_2) \} | g \rangle. \quad (11.60)$$

Функция Грина обладает многими важными свойствами. Функция  $G(k, E)$  дает энергии возбуждений элементарных возбуждений, рождаемых операторами  $c_k$  и  $c_k^\dagger$ , а также силу каждого возбуждения. При  $r_1 = r_2 = r$ ,  $t_1 = t_2 = t$  формула (11.60) дает среднее значение плотности частиц в точке  $r$  в момент времени  $t$ . Аналогично из формулы (11.56a) получаем, что  $G(k, 0)$  дает функцию распределения частиц по импульсам в основном состоянии. Функция Грина (11.60) описывает рождение частицы в точке  $r_2$  в момент времени  $t_2$  и уничтожение частицы в более поздний момент времени  $t_1$  в точке  $r_1$ . Можно также считать, что она описывает рождение дырки в точке  $r_1$  в момент времени  $t_1$  и уничтожение дырки в точке  $r_2$  в более поздний момент времени  $t_2$ . Дырочное возбуждение можно описать так же, как рождение частицы в точке  $r_2$  в момент времени  $t_2$  и уничтожение частицы в точке  $r_1$  в более ранний момент времени  $t_1$ , так как дырку можно представить как частицу, которая движется «назад» по времени. Указанное представление оказывается очень полезным в квантовой теории поля, а также при исследовании диаграмм, дающих различные вклады в проблеме многих тел.

Пока что мы дали формальные определения спектральной весовой функции и функции Грина, а также убедились в том, что они вбирают в себя интересную физическую информацию. Однако для того, чтобы эти функции действительно были полезными, мы должны располагать каким-то способом приближенного вычисления



их на основании уравнения Шредингера, не требующим строить решение его для основного состояния. Действительно, такой способ существует. Можно составить уравнение движения, которому удовлетворяет функция Грина, если продифференцировать (11.57) по  $\tau$ . Согласно (11.57б), производная по  $\tau$  должна даваться суммой двух слагаемых: происходящего от дифференцирования аргумента гейзенберговского оператора и происходящего от дифференцирования  $\theta$ -функции, которое дает  $\delta$ -функцию. В результате имеем

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} G(k, \tau) = \langle g | T \left\{ \frac{\partial c_k(\tau)}{\partial \tau} c_k^\dagger(0) \right\} | g \rangle + \delta(\tau), \quad (11.61)$$

так как матричный элемент, возникающий в виде множителя перед  $\delta(\tau)$ , является в точности матричным элементом от антикоммутатора операторов, взятых при  $\tau = 0$  (так что этот матричный элемент равен 1). Чтобы вычислить производную по времени от оператора уничтожения, входящую в (11.61), заметим, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_k(\tau)}{\partial \tau} &= \frac{d}{d\tau} [e^{iH\tau/\hbar} c_k(0) e^{-iH\tau/\hbar}] = \\ &= \frac{i}{\hbar} e^{iH\tau/\hbar} [H, c_k(0)] e^{-iH\tau/\hbar} = \frac{1}{\hbar} [H, c_k(\tau)]. \end{aligned} \quad (11.62)$$

Таким образом, если мы имеем гейзенберговское уравнение движения для оператора  $c_k(\tau)$ , то можем вывести из него уравнение движения (11.61) для функции Грина. Если мы линеаризуем уравнение движения (11.61), то придем к хартри-фоковскому приближению и некоторому линейному уравнению для функции  $G(k, \tau)$ , которое можно сразу разрешить. В приближении, идущем дальше хартри-фоковского, в правой части уравнения (11.61) появляются дополнительные члены более высокого порядка по операторам рождения и уничтожения. Один из способов учета этих членов состоит в рассмотрении функций Грина более высоких порядков и выписывании уравнения движения для них, т. е. для двухчастичной функции Грина, трехчастичной функции Грина и т. д. Уравнения для функций Грина различных порядков все связаны друг с другом и вместе образуют бесконечную цепочку уравнений. При работе с этой цепочкой уравнений часто используют приближение, заключающееся в том, что обрывают эту бесконечную цепочку на каком-то месте, т. е., например, пренебрегают корреляциями более чем двух частиц или более чем трех частиц и т. д.

Другой возможный подход к решению уравнения (11.61) дает теория возмущений, в которой гамильтониан системы представляется в виде суммы нулевого гамильтониана, ответственного за хартри-фоковское приближение, и некоторого возмущающего гамильтониана. Этот подход к изучению уравнения (11.61) был

развит сначала в квантовой электродинамике и получил свое наиболее сжатое выражение в технике диаграмм Фейнмана.

Аналогично рассуждая, можно получить уравнение движения для пространственно-временной функции Грина (11.60). Дифференцируя по  $t_1$ , имеем

$$i \frac{\partial}{\partial t_1} G(\mathbf{r}_1 t_1; \mathbf{r}_2 t_2) = \frac{i}{\hbar} \langle g | :T \{ [H, \psi(\mathbf{r}_1, t_1)] \} \psi^\dagger(\mathbf{r}_2, t_2) | g \rangle + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2). \quad (11.63a)$$

Последнее уравнение можно записать также в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t_1} G(\mathbf{r}_1 t_1; \mathbf{r}_2 t_2) = - \frac{i}{\hbar} [H(\mathbf{r}_1), G(\mathbf{r}_1 t_1; \mathbf{r}_2 t_2)] + \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(t_1 - t_2), \quad (11.63b)$$

причем здесь оператор  $H(\mathbf{r}_1)$  действует только на операторы  $G$ , взятые для момента времени  $t_1$ . Последнее уравнение объясняет, почему рассматриваемые здесь функции действительно называются функциями Грина.

### Задачи

1. Рассмотрите простую модель ферромагнетика, в которой  $N$  отдельных спинов  $1/2$  взаимодействуют друг с другом и с внешним магнитным полем и которая описывается гамильтонианом

$$H = -g \sum_{i=1}^N h \sigma_{zi} - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \sum_{j=1}^N G_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j.$$

а) Покажите, что оператор квадрата полного спина  $S^2$  коммутирует с гамильтонианом  $H$ .

б) Выпишите гейзенберговские уравнения движения для операторов составляющих полного спина  $S_x$  и  $S_y$ .

в) Какие заключения об энергетическом спектре можно сделать, основываясь на уравнениях движения для  $S_x$  и  $S_y$ ?

г) Покажите с помощью вариационного принципа, что если все параметры  $g$ ,  $h$  и  $G_{ij}$  положительны, то волновая функция основного состояния должна быть собственной функцией операторов  $S^2$  и  $S_z$  с собственными значениями  $1/2 N$  и  $+1/2 N$ . Обозначьте это состояние как  $|1/2 N, +1/2 N\rangle$ .

2. Предположите, что все спины образуют одномерную решетку с равноотстоящими узлами, расположенными на прямой, параллельной оси  $z$ . Считайте, что удовлетворяются периодические граничные условия  $\sigma_{i+N} = \sigma_i$ . Пусть  $g$ ,  $h$  и  $G_{ij}$  положительны, тогда состояние  $|1/2 N, +1/2 N\rangle$  будет основным состоянием,

как это утверждается в задаче 1 г. Гамильтониан такой системы инвариантен относительно дискретной трансляции  $\sigma_i \rightarrow \sigma_{i+1}$ .

а) Будет ли основное состояние собственным состоянием этого трансляционного оператора? Если будет, то найдите собственное значение.

б) Выпишите уравнение движения для оператора  $\sum_{j=1}^N e^{2\pi i n j} \sigma_{j-}$ ,

где  $n$  — любое целое число и  $\sigma_{j-} = \sigma_{jx} - i\sigma_{jy}$ . Убедитесь, что этот оператор рождает элементарные возбуждения системы в основном состоянии.

в) Покажите, что состояние, рождаемое оператором из задачи 2б, вырождено с основным состоянием, если  $\hbar = 0$  и  $n = 0$ .

г) Будут ли состояния, рожденные операторами из задачи 2б, собственными для операторов  $S^2$  и  $S_z$ , а также для трансляционного оператора  $\sigma_i \rightarrow \sigma_{i+1}$ ? Найдите собственные значения.

3. Вычислите энергию основного состояния электронного газа в хартри-фоковском приближении и покажите, что расчет ее по теории возмущений во втором порядке приводит к расходимости.

4. Предположите, что  $|\langle E' | \psi(0) \rangle|^2 = C [(E' - \bar{E})^2 + (\frac{1}{2}\Gamma)^2]^{-1}$  в формуле (11.12а), считая  $C$  и  $\Gamma$  некоторыми постоянными. Убедитесь, что формулами (11.116) и (11.12б) нельзя пользоваться в этом случае, но что заключения в отношении времени жизни и ширины состояния остаются верными:

$$\overline{\Delta E^2} = \sum_{E'} (E' - \bar{E})^2 |\langle E' | \psi(t) \rangle|^2 = \sum_{E'} (E' - \bar{E})^2 |\langle E' | \psi(0) \rangle|^2, \quad (11.116)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(0) \rangle = e^{i\bar{E}t/\hbar} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \frac{\overline{\Delta E^2}}{\hbar^2} t^2 + \dots \right\}. \quad (11.12б)$$

5. Для ядра  $^{16}\text{O}$  выпишите полную систему линейно независимых операторов, которые рождают частично-дырочные возбуждения с моментом количества движения и четностью 1<sup>-</sup>; они уничтожают одну частицу на орбите  $p_{1/2}$  или  $p_{3/2}$  и рождают одну частицу на орбите  $s_{1/2}$ ,  $d_{3/2}$  или  $d_{5/2}$ . Прodelайте то же самое для оккупольных возбуждений, т. е. для возбужденных состояний 3<sup>-</sup>.

6. Рассмотрите электронный газ в поле однородного фона положительного заряда и вычислите экранировку кулоновского потенциала в приближении Томаса — Ферми. [Указание. Рассчитайте потенциал, создаваемый малым положительным точечным зарядом, вносимым в электронный газ, а) включив в теорию Томаса — Ферми из гл. 9 эффекты однородного фона положительного заряда, б) линеаризовав нелинейное дифференциальное уравнение в предположении, что  $Z$  мало, в) разрешив это линеаризованное уравнение.]

Если этот экранированный потенциал использовать при расчете поправки второго порядка к энергии основного состояния вместо кулоновского потенциала, то как это повлияет на ответ задачи 3?

7. Выпишите линеаризованные уравнения движения для квазичастичных возбуждений в случае редуцированного гамильтониана БКШ, в котором положено  $G_{kk'} = G$ . Рассчитайте энергии возбуждений, рождаемых оператором  $xa_{k\downarrow}^\dagger + ya_{-k\downarrow}$ , для которого параметры  $x$  и  $y$  являются решениями уравнений движения. Используйте волновую функцию БКШ основного состояния в линеаризованном приближении и убедитесь, что операторы  $a_{k\uparrow}^\dagger$ ,  $a_{-k\downarrow}^\dagger$  и  $a_{k\uparrow}$ ,  $a_{-k\downarrow}$  имеют отличные от нуля средние значения для этой волновой функции.

## *VII. Формализм фейнмановских диаграмм в изложении для пешеходов*

### *Введение*

В гл. 12 представлен простой нерелятивистский вариант современного формализма временной теории возмущений, использующий фейнмановские диаграммы; это позволяет проиллюстрировать особую ценность его в применении как к задачам ядерной физики и физики твердого тела, так и к задачам релятивистской квантовой теории поля. Существенно новая черта современного формализма теории возмущений, как мы ниже покажем, состоит в том, что в нем используются «промежуточные частицы», участвующие в промежуточных, виртуальных процессах, а не «промежуточные состояния» квантовой системы. Отдельные члены в разложении теории возмущений в новом формализме характеризуются определенными наборами «промежуточных частиц» и включают в себя вклады от всех возможных «промежуточных состояний», возникающих в результате различных временных упорядочений отдельных квантовых переходов, в которых участвуют одни и те же промежуточные частицы данного набора, т. е. создаются и уничтожаются. В членах высоких порядков, характеризующихся наборами большого числа промежуточных частиц, возможно много способов временного упорядочения процессов для данного набора промежуточных частиц. В старом формализме теории возмущений каждое временное упорядочение соответствует определенному набору промежуточных состояний, т. е. определенному члену ряда. В новом формализме теории возмущений существенно проще проводить расчеты процессов высоких порядков даже в рассматриваемом здесь нерелятивистском варианте теории. В этом новом формализме теории возмущений есть, однако, и еще одно важное упрощение, которое состоит в том, что «дырки» в теории многочастичных систем и «античастицы» в квантовой теории поля представляются здесь как частицы, движущиеся

назад во времени. Это позволяет исключительно просто изучать процессы рождения и уничтожения пар частиц, не вводя в гамильтониан каких-либо дополнительных операторных членов.

В первом порядке теории возмущений старый формализм, развитый в гл. 7, удовлетворительно описывает «золотое правило», а также приводит к весьма поучительной картине временной эволюции квантовой системы, закону сохранения энергии и соотношению неопределенности энергии и времени. Новый формализм в первом порядке не дает никаких преимуществ. Во втором порядке теории возмущений мы имеем только одно промежуточное состояние и сложности, связанные с различными временными упорядочениями промежуточных процессов, не возникают; они впервые появляются только в третьем порядке, так что необходимо идти до третьего порядка, чтобы увидеть настоящие достоинства нового формализма теории возмущений перед старым. Оказывается, что в высоких порядках вычисления можно провести только в рамках нового формализма; в старом формализме их выполнить практически невозможно. Кроме того, сразу же выясняется, что в новом формализме можно суммировать определенные классы диаграмм, отбрасываемых в каждом порядке теории возмущений до бесконечности.

Чтобы описать новый формализм теории возмущений, рассмотрим ниже со всеми подробностями один конкретный процесс рассеяния в третьем порядке. С самого начала в теории будем использовать простой феноменологический гамильтониан, содержащий гамильтонианы свободных фермионов и бозонов, а также включающий оператор их взаимодействия, который описывает испускание и поглощение бозонов фермионами. Сначала мы изучим все возможные промежуточные состояния системы и составим сумму слагаемых, которые дает старая теория возмущений и которые характеризуются различными энергетическими знаменателями. Затем, алгебраически упростив полученную сумму, напишем вместо нее выражение с одним энергетическим знаменателем. Этот новый знаменатель характеризует имеющиеся отклонения от строгого закона сохранения энергии для промежуточных частиц (но не промежуточных состояний). Оказывается, указанный знаменатель или «фактор отклонения» как раз и является «пропагатором» частицы в рассматриваемом в гл. 12 новом формализме теории возмущений; его можно интерпретировать как описывающий движение частицы «вне энергетической оболочки» (или вне «массовой оболочки» в релятивистской теории). Конкретный рассматриваемый процесс третьего порядка мы обчитываем затем в рамках нового формализма теории возмущений и таким образом получаем правила для составления вкладов от процессов, изображаемых отдельными фейнмановскими диаграммами.

В § 4 гл. 12 приведен особый «квантовополевой способ рассуждений», позволяющий многие задачи, имеющиеся в квантовой теории поля, легко разрешать путем исследования топологической структуры соответствующих фейнмановских диаграмм, не проводя вообще при этом никаких вычислений. Показано, что многие фейнмановские диаграммы представляют совсем неинтересные величины, например описывают различие между свойствами физического состояния и нефизического невозмущенного состояния, в которое переходит физическое состояние при выключении взаимодействия. Указанные фейнмановские диаграммы можно формально исключить из рассмотрения с помощью процедуры, называемой «ренормировкой», т. е. путем проведения суммирований их вкладов и объявления сумм величинами, точно равными наблюдаемым значениям изучаемых физических величин. В § 5 гл. 12 подробно рассматривается теория полярона в качестве простого примера квантовой теории поля, причем поляроны изучаются с помощью особого приближенного метода, являющегося обобщением метода Хартри — Фока из теории многочастичных систем. Исследуется классический предел, в котором бозоны, имеющиеся около фиксированного источника, рассматриваются как классическое статическое поле, удовлетворяющее уравнению Пуассона. В § 4 и 5 гл. 12 читатель знакомится с «полевым способом рассуждений» и теорией полярона вне всякой связи с материалом, изложенным в § 1—3 гл. 12.

## Глава 12. ФЕЙНМАНОВСКИЕ ДИАГРАММЫ, ПРОПАГАТОРЫ ЧАСТИЦ И КВАНТОВАННЫЕ ПОЛЯ

### § 1. Введение

Займемся теперь изложением современного формализма временной теории возмущений, который первоначально был разработан Фейнманом для квантовой электродинамики и который теперь широко используется в теории элементарных частиц, в теории твердого тела и в других разделах теоретической физики. В старом формализме временной теории возмущений при изучении переходов из начального в конечное состояние считалось, что они происходят через наборы различных *промежуточных*, или *виртуальных*, состояний. В переходах между промежуточными состояниями энергия не сохраняется, и из-за этого появляются всем известные энергетические знаменатели в выражении для матричного элемента для указанного перехода. Каждый энергетический знаменатель равен разности энергий промежуточного и начального (или конечного) состояний. Каждое промежуточное состояние характеризуется некоторым числом промежуточных частиц. В фейнмановском новом формализме обращается основное внимание как раз на эти *промежуточные*, или *виртуальные*, частицы, а вовсе не на промежуточные состояния. Ниже мы проиллюстрируем различие обоих формализмов на примере одной весьма типичной системы.

Рассмотрим систему фермионов и бозонов с взаимодействием, описывающим испускание и поглощение бозонов фермионами. Эту модель можно применить к очень многим физически интересным задачам в квантовой электродинамике, в теории электронно-фононного взаимодействия в твердых телах и в теории взаимодействия нуклонов с мезонами. Пусть  $c_k^\dagger$  и  $a_q^\dagger$  означают операторы рождения фермиона в состоянии  $k$  с энергией  $E_k$  и бозона в состоянии  $q$  с энергией  $\omega_q$ . Индексы  $k$  и  $q$  означают полные наборы соответствующих квантовых чисел (включая спиновые квантовые числа), которые требуется задавать, чтобы полностью охарактеризовать одночастичные состояния. Последние будем считать либо состояниями плоских волн, либо хартри-фоковскими состояниями.

Предположим, что гамильтониан имеет вид

$$H = H_0 + V, \quad (12.1a)$$



где  $H_0$  — гамильтониан, описывающий невзаимодействующие фермионы и бозоны, т. е.

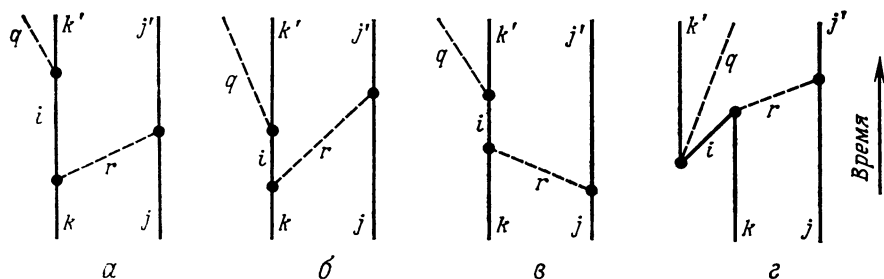
$$H_0 = \sum_k E_k c_k^\dagger c_k + \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q. \quad (12.16)$$

Гамильтониан взаимодействия  $V$  мы возьмем в совершенно общем виде

$$V = \sum_{j k q} (g_{j k q} c_j^\dagger c_k a_q + g_{j k q}^* c_k^\dagger c_j a_q^\dagger), \quad (12.1в)$$

где  $g_{j k q}$  — некоторые коэффициенты, произвольным образом зависящие от индексов  $j, k, q$ .

Рассмотрим теперь конкретный процесс рассеяния, в котором два фермиона, первоначально находившиеся в состояниях  $j$  и  $k$ ,



Фиг. 12.1. Сплошными линиями обозначены фермионы, пунктирным и — бозоны; точки пересечения сплошных линий и пунктирных представляют собой вертексы, в которых испускается или поглощается бозон.

рассеиваются в состояниях  $j'$  и  $k'$ , причем одновременно испускается бозон в состоянии  $q$ . Этот процесс является процессом третьего порядка по взаимодействию  $V$ , и в старой теории возмущения его описывали как процесс обмена бозоном между двумя фермионами, сопровождаемый испусканием еще одного бозона. При расчете возникало много членов, соответствующих различным способам взаимного упорядочения во времени акта испускания конечного бозона и актов испускания и поглощения обменного бозона.

Рассмотрим, например, два возможных набора промежуточных состояний, соответствующих диаграммам, изображенным на фиг. 12.1, *a* и *б*. С каждой из этих диаграмм связано три следующих перехода:

- 1) фермион, находившийся в состоянии  $k$ , испускает бозон в состоянии  $r$ , а сам переходит в промежуточное состояние  $i$ ;
- 2) фермион, находившийся в состоянии  $j$ , поглощает этот бозон  $r$  и переходит в конечное состояние  $j'$ ;

3) фермион, находясь в промежуточном состоянии  $i$ , испускает конечный бозон в состоянии  $q$ , а сам переходит в конечное состояние  $k'$ .

Диаграммы на фиг. 12.1,  $a$  и  $b$  различаются только разным временным порядком следования двух последних переходов. Члены, появляющиеся в третьем порядке в теории возмущений и соответствующие двум указанным диаграммам, имеют, таким образом, одинаковые матричные элементы взаимодействия и различные энергетические знаменатели.

## § 2. Энергетические знаменатели и пропагаторы частиц

Давайте вычислим энергетические знаменатели в явном виде для конкретных рассматриваемых квантовых переходов, составляя разности энергий между соответствующими промежуточными состояниями и начальным (или конечным) состоянием. Учтем при этом закон сохранения энергии, который во временной теории возмущений обязательно должен выполняться для начального и конечного состояний. Таким образом, имеем

$$E_k + E_j = E_{k'} + E_{j'} + \omega_q; \quad (12.2)$$

первое промежуточное состояние для диаграммы на фиг. 12.1,  $a$  отличается от начального состояния тем, что фермион находится в состоянии  $i$ , а не  $k$ , и имеется еще бозон в состоянии  $r$ . Энергетический знаменатель для этого состояния равен

$$\Delta E_{a1} = E_i + \omega_r - E_k. \quad (12.3a)$$

Второе промежуточное состояние для диаграммы на фиг. 12.1,  $a$  отличается от конечного состояния тем, что фермион находится в состоянии  $i$ , а не  $k'$ , и нет бозона в состоянии  $q$ . Энергетический знаменатель для этого промежуточного состояния равен

$$\Delta E_{a2} = E_i - \omega_q - E_{k'}. \quad (12.3б)$$

Аналогично рассуждая, для диаграммы на фиг. 12.1,  $b$  имеем

$$\Delta E_{b1} = E_i + \omega_r - E_k, \quad (12.3в)$$

$$\Delta E_{b2} = E_j + \omega_r - E_{j'}. \quad (12.3г)$$

Вклад от каждой диаграммы в матричный элемент перехода обратно пропорционален произведению двух энергетических знаменателей (12.3а), (12.3б) или (12.3в), (12.3г) и прямо пропорционален матричным элементам взаимодействия и кинематическим множителям. Поскольку матричные элементы взаимодействия и кинематические множители совершенно одинаковы для обеих диаграмм на фиг. 12.1,  $a$  и  $b$ , то мы можем сумму двух вкла-

дов от этих диаграмм в матричный элемент перехода  $T$  записать в виде произведения некоторого общего множителя  $F$  и суммы двух слагаемых, каждое из которых представляет собой произведение двух энергетических знаменателей, т. е. мы имеем

$$T = F \left\{ \frac{1}{\Delta E_{a1} \Delta E_{a2}} + \frac{1}{\Delta E_{b1} \Delta E_{b2}} \right\}, \quad (12.4a)$$

$$T = F \left\{ \frac{1}{(E_i + \omega_r - E_k)(E_i - \omega_q - E_{k'})} + \frac{1}{(E_i + \omega_r - E_k)(E_j + \omega_r - E_{j'})} \right\}. \quad (12.4б)$$

Складывая вместе оба слагаемых в фигурных скобках, получаем

$$T = F \left\{ \frac{(E_j + \omega_r - E_{j'}) + (E_i - \omega_q - E_{k'})}{(E_i + \omega_r - E_k)(E_i - \omega_q - E_{k'})(E_j + \omega_r - E_{j'})} \right\}. \quad (12.4в)$$

Последнее выражение можно упростить, если использовать закон сохранения энергии (12.2) и преобразовать числитель. Итак, мы получаем

$$T = F \cdot \frac{1}{(E_i - \omega_q - E_{k'})(E_j + \omega_r - E_{j'})}. \quad (12.4г)$$

Следовательно, сумма вкладов от двух диаграмм, изображенных на фиг. 12.1, *a* и *б*, такого же простого вида, как и вклад от каждой отдельной диаграммы, т. е. мы имеем один множитель, являющийся произведением двух знаменателей.

Различие между выражением (12.4г) и слагаемыми в сумме (12.4б) удобно интерпретировать следующим образом. Диаграммы 12.1, *a* и *б* имеют каждая по два промежуточных, виртуальных, состояния и по две промежуточные, виртуальные, частицы, которые присутствуют только в промежуточных состояниях, а в начальном и конечном состояниях их нет. Это фермион в состоянии  $i$  и бозон в состоянии  $g$ . Энергетические знаменатели в формулах (12.3a) — (12.3г) составлены для двух промежуточных, виртуальных, состояний. Энергетические знаменатели в выражении (12.4г) составлены для двух виртуальных частиц.

Первый множитель в (12.4г) характеризует несохранение энергии при поглощении фермионом  $i$  бозона  $q$ , а второй множитель — несохранение энергии при поглощении фермионом  $j$  бозона  $g$ . Эти множители одинаковы для обеих диаграмм 12.1, *a* и *б* и не зависят от способа временного упорядочения отдельных актов взаимодействия на диаграммах 12.1, *a* и *б*. Из выражения (12.4г) непосредственно следует, что мы можем связать несохранение энергии с соответствующей промежуточной виртуальной частицей и не рассматривать многочастичные состояния целиком. Эти частицы надо считать, однако, движущимися «вне энергетической оболочки». Вследствие указанного изменения интерпретации энер-

гий в знаменателях мы можем писать один вклад вместо суммы двух отдельных вкладов от диаграмм на фиг. 12.1, *a* и *б*. Нужно только составить правильные энергетические знаменатели для каждой имеющейся в нашем распоряжении виртуальной частицы, а не составлять их для виртуальных промежуточных состояний. Мы имеем теперь один вклад вместо двух и должны поэтому рассматривать лишь одну диаграмму заданной топологической структуры. Нам совсем не нужно заботиться о различных способах временных упорядочений отдельных вертексов взаимодействия (они получаются путем непрерывного деформирования исходной диаграммы при фиксированных квантовых числах частиц, изображаемых линиями диаграммы). Для процессов более высокого порядка, в которых может быть более двух способов временного упорядочения вертексов на каждой данной диаграмме, уменьшение числа вкладов, возникающее при применении описанной процедуры, становится весьма ощутимым.

Диаграмма, приведенная на фиг. 12.1, *в*, сходна с диаграммами на фиг. 12.1, *a* и *б*. Она отличается от них другим направлением во времени линии обмениваемого бозона. Энергетические знаменатели для этой диаграммы равны

$$\Delta E_{c1} = E_j + \omega_r - E_j, \quad (12.5a)$$

$$\Delta E_{c2} = E_i - \omega_q - E_k. \quad (12.5b)$$

Они аналогичны входящим в выражение (12.4г). Так как кинематические множители и матричные элементы взаимодействия те же, что и для диаграмм, изображенных на фиг. 12.1, *a* и *б*, то вклады от всех трех рассматриваемых диаграмм можно объединить, складывая просто соответствующие произведения энергетических знаменателей:

$$\frac{1}{\Delta E_{a1}\Delta E_{a2}} + \frac{1}{\Delta E_{b1}\Delta E_{b2}} + \frac{1}{\Delta E_{c1}\Delta E_{c2}} = \frac{2\omega_r}{(E_i - \omega_q - E_k) [\omega_r^2 - (E_j - E_j)^2]}. \quad (12.6)$$

На фиг. 12.1, *a* и *б* бозон *г* испускается фермионом, находящимся в состоянии *k*, и поглощается фермионом, находящимся в состоянии *j*. На фиг. 21.1, *в*, однако, этот бозон испускается фермионом, находящимся в состоянии *j*, и поглощается фермионом, находящимся в состоянии *k*. Если бозон имеет электрический заряд (например, является пионом, который рассматривается в теории рассеяния нуклонов на нуклонах, объясняющей рассеяние процесса обмена пионами), то бозон на фиг. 12.1, *в* должен иметь противоположный электрический заряд по сравнению с бозоном на фиг. 12.1, *a* и *б*. Таким образом, диаграмма на фиг. 12.1, *в* описывает обмен бозоном, который является *античастицей* для того бозона, которым обмениваются фермионы на диаграммах, изоб-

раженных на фиг. 12.1, а и б. Чтобы сумма вкладов от трех рассматриваемых диаграмм в матричный элемент оператора перехода действительно сводилась к сумме (12.6), матричные элементы взаимодействия должны быть одинаковыми для обмена частицей и античастицей с заданными квантовыми числами.

Знаменатель в (12.6) снова распадается на произведение двух множителей, каждый из которых соответствует своей виртуальной частице, при этом множитель, отвечающий бозону  $r$ , не является просто энергетическим знаменателем, а имеет более сложный вид. Такой более сложного вида множитель называют *пропагатором*. В выражение, которое является произведением таких пропагаторов для каждой виртуальной частицы, входит не только сумма вкладов от всех диаграмм, имеющих одинаковую топологическую структуру и различающихся разными способами временного упорядочения вертексов, но также и сумма вкладов от всех диаграмм, в которых некоторые (или все) промежуточные виртуальные частицы заменены на античастицы. Отметим, что пропагатор для бозона  $r$ , который появился у нас в выражении (12.6), имеет очень интересную структуру. Для бозона с импульсом  $p_r$  и массой  $M$  имеем

$$\omega_r^2 = p_r^2 + M^2 c^4, \quad (12.7a)$$

а следовательно,

$$\omega_r^2 - (E_j - E_{j'})^2 = M^2 c^4 - (E_r^2 - p_r^2), \quad (12.7b)$$

где

$$E_r^2 = (E_j - E_{j'})^2, \quad (12.7в)$$

т. е. это квадрат энергии бозона, которую он имел бы в том случае, если бы энергия строго сохранялась при испускании и поглощении бозона. Выражение (12.7б) можно рассматривать, таким образом, как разность между квадратом массы реального бозона и квадратом массы виртуального бозона, который движется «вне энергетической оболочки». Такое выражение, кроме всего прочего, релятивистски инвариантно, и его можно непосредственно использовать в релятивистской теории.

Рассуждая подобным образом, можно убедиться, что вклад от диаграммы на фиг. 12.1, г тоже нужно включить в рассматриваемую сумму вкладов. На этой диаграмме обращено направление во времени одной фермионной линии; этот фермион изображает античастицу, или дырку, если мы рассматриваем нерелятивистскую многочастичную систему. Бозон  $q$  теперь испускается с рождением частично-дырочной фермионной пары, а затем образовавшаяся дырка аннигилирует с начальным фермионом и при этом испускается обменываемый бозон. «Дырочную» теорию античастиц мы будем подробно обсуждать в гл. 13.

### § 3. Диаграммный формализм теории возмущений

Как мы объяснили, в фейнмановском диаграммном формализме теории возмущений мы должны рассматривать виртуальные частицы, а не виртуальные состояния и сопоставлять каждой из них некоторый определенный множитель, называемый «пропагатором», а не энергетические знаменатели для каждого состояния. Пропагаторы мы должны выбирать с таким расчетом, чтобы одна диаграмма вбирала в себя большое число вкладов, имеющих в старой теории возмущений и характеризующихся различными «промежуточными состояниями». Иначе говоря, диаграмма должна содержать все те члены, которые получаются путем временных упорядочений различных актов испускания и поглощения виртуальных частиц или же путем обращения направлений нескольких или всех линий во времени, т. е. путем преобразования частиц в дырки или античастицы. При этом вышеуказанные пропагаторы можно сразу сделать релятивистски инвариантными, что позволит легко придать всей теории очевидно релятивистски ковариантную форму.

Энергии и импульсы следует приписывать виртуальным частицам таким образом, чтобы энергии и импульсы всех частиц, представленных на диаграмме, всегда сохранялись в каждом акте взаимодействия, а в остальном энергии и импульсы виртуальных частиц могут быть совершенно произвольными, т. е. связаны только законами сохранения. Соотношения между энергией и импульсом, выполняющиеся для свободных физических частиц, для виртуальных частиц не справедливы. Виртуальные частицы на самом деле нужно считать движущимися вне их «массовой оболочки», или вне их «энергетической оболочки». Пропагатор характеризует величину удаления данной частицы от ее массовой оболочки.

Разовьем новый фейнмановский формализм теории возмущений. Начнем с рассмотрения решения (7.386) временного уравнения Шредингера, полученного методом последовательных приближений в представлении взаимодействия:

$$\begin{aligned} \psi_I(t) = & \psi_I(t_0) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t V(t_1) \psi_I(t_0) dt_1 + \\ & + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t V(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} V(t_2) dt_2 \psi_I(t_0) + \\ & + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^t V(t_1) dt_1 \int_{t_0}^{t_1} V(t_2) dt_2 \int_{t_0}^{t_2} V(t_3) dt_3 \psi_I(t_0) + \dots \quad (12.8) \end{aligned}$$

В задаче рассеяния мы фиксируем начальное состояние  $|i\rangle$ , которое по предположению является собственным состоянием гамильтониана  $H_0$  и представляет изучаемое решение задачи рассеяния в определенный момент времени в бесконечном прошлом, т. е. до акта рассеяния. Чтобы описать это начальное состояние, надо формально положить  $t_0 = -\infty$ :

$$\psi_I(t_0 = -\infty) = |i\rangle, \quad (12.9a)$$

$$H_0|i\rangle = E_i|i\rangle. \quad (12.9б)$$

Мы интересуемся в задаче рассеяния вероятностью перехода в единицу времени квантовой системы из состояния  $|i\rangle$  в состояние  $|f\rangle$ , которое также является собственной функцией оператора  $H_0$ , т. е.

$$H_0|f\rangle = E_f|f\rangle. \quad (12.9в)$$

Матричный элемент  $S$ -матрицы, берущийся между состояниями  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$ , представляет собой скалярное произведение состояния  $|f\rangle$  и точного решения уравнения Шредингера, которое надо взять в момент времени  $t = +\infty$ . Подставляя (12.9a) — (12.9в) в решение (12.8), полученное методом последовательных приближений, мы сразу находим ряд теории возмущений для матричного элемента  $S$ -матрицы:

$$\begin{aligned} \langle f|S|i\rangle &= \langle f|\psi_I(+\infty)\rangle = \langle f|i\rangle + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \langle f|V(t_1)|i\rangle + \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \langle f|V(t_1)V(t_2)|i\rangle \theta(t_1 - t_2) + \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_3 \langle f|V(t_1)V(t_2)V(t_3)|i\rangle \times \\ &\times \theta(t_1 - t_2)\theta(t_2 - t_3) + \dots = \langle f|S^0|i\rangle + \langle f|S^{(1)}|i\rangle + \\ &+ \langle f|S^{(2)}|i\rangle + \langle f|S^{(3)}|i\rangle + \dots \end{aligned} \quad (12.10)$$

Здесь мы немного преобразовали члены второго и третьего порядков, представив их в виде, более удобном для последующих преобразований. Верхние пределы во всех интегралах мы положили равными  $+\infty$ , включив в подынтегральные выражения соответствующие  $\theta$ -функции, которые удаляют возникающие лишние вклады в интегралах.

Для задачи рассеяния, которой мы здесь интересуемся, можем положить

$$|i\rangle = c_k^\dagger c_j^\dagger |0\rangle, \quad (12.11a)$$

$$|f\rangle = a_q^\dagger c_k^\dagger c_j^\dagger |0\rangle, \quad (12.11b)$$

поэтому первым исчезающим вкладом в (12.10) будет вклад членов третьего порядка. Действительно, произведение трех операторов взаимодействия  $V$  должно содержать операторы  $c_k$  и  $c_j$ , которые уничтожают оба фермиона в начальном состоянии, а также операторы  $c_k^\dagger$ ,  $c_j^\dagger$  и  $a_q^\dagger$ , которые рожают нужные два фермиона и одну бозонную частицу в конечном состоянии. В произведении трех операторов  $V$  имеется еще два фермионных оператора и два бозонных оператора из девяти операторов рождения и уничтожения. Чтобы получился ненулевой матричный элемент, фермионные операторы должны родить и уничтожить какое-то одно фермионное состояние, а бозонные операторы — одно и то же бозонное состояние. Обозначим фермионное промежуточное состояние индексом  $i$ , а промежуточное бозонное состояние индексом  $r$ , так же как на фиг. 12.1.

Рассмотрим теперь все возможные способы, которыми можно распределить девять операторов:  $c_k$ ,  $c_j$ ,  $c_k^\dagger$ ,  $c_j^\dagger$ ,  $c_i^\dagger$ ,  $c_i$ ,  $a_q^\dagger$ ,  $a_r^\dagger$  и  $a_r$  по трем операторам взаимодействия  $V$ . Положим

$$V_a = c_k^\dagger c_i a_q^\dagger g_{ik'q}^*, \quad (12.12a)$$

$$V_b = c_i^\dagger c_k [a_r^\dagger g_{kir}^* + a_{-r} g_{ik-r}], \quad (12.12b)$$

$$V_c = c_j^\dagger c_j [a_r g_{j'r} + a_{-r}^\dagger g_{j' -r}^*], \quad (12.12b)$$

$$V_{b'} = c_k^\dagger c_i [a_r^\dagger g_{ik'r}^* + a_{-r} g_{k'i-r}], \quad (12.12r)$$

$$V_{a'} = c_i^\dagger c_k a_q^\dagger g_{kiq}^*. \quad (12.12d)$$

Здесь мы использовали индекс  $-r$  для обозначения импульса бозона, поскольку уничтожение бозона с импульсом  $-r$  приводит к такой же передаче импульса, что и рождение бозона с импульсом  $r$ .

Легко видеть, что два произведения  $V_a V_b V_c$  и  $V_{a'} V_b' V_c$  имеют отличные от нуля матричные элементы, взятые между состояниями  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$ . Остальные произведения можно получить из двух приведенных произведений, переставляя между собой индексы  $j$  и  $k$  и (или) индексы  $j'$  и  $k'$ . Таким образом мы находим все возможные произведения, которые дают ненулевые матричные элементы. Ниже, однако, мы будем рассуждать только о произведениях  $V_a V_b V_c$  и  $V_{a'} V_b' V_c$  и совсем не будем специально рассматривать произведения, получаемых из них при перестановках  $j$  с  $k$  и  $j'$  с  $k'$ . Мы можем, таким образом, подставить в член третьего



порядка, имеющийся в (12.10), выражение

$$V(t_i) = V_a(t_i) + V_b(t_i) + V_c(t_i) + V_{a'}(t_i) + V_{b'}(t_i). \quad (12.13)$$

Тогда из члена третьего порядка возникают 12 не обращающихся в нуль слагаемых, которые соответствуют 6 способам распределения  $V_a$ ,  $V_b$ ,  $V_c$ , а также  $V_{a'}$ ,  $V_{b'}$ ,  $V_c$  по временам  $t_1$ ,  $t_2$  и  $t_3$ . Поскольку  $t_1$ ,  $t_2$  и  $t_3$  являются переменными интегрирования, мы можем обозначить их по-новому, например как  $t_a$ ,  $t_b$  и  $t_c$ . Мы должны делать эту замену переменных всякий раз для каждого рассматриваемого члена с таким расчетом, чтобы аргументами  $V_a$ ,  $V_{a'}$ ,  $V_b$ ,  $V_{b'}$  и  $V_c$  были всегда  $t_a$ ,  $t_{a'}$ ,  $t_b$ ,  $t_{b'}$  и  $t_c$  соответственно. Таким образом, для каждого получаемого члена  $\theta$ -функции будут теперь различными и будут вырезать разные области из полной области изменения переменных  $t_a$ ,  $t_b$ ,  $t_c$ , а в члене третьего порядка в (12.10)  $\theta$ -функции вырезают одну область  $t_1 \geq t_2 \geq t_3$ . Проведя замены переменных, мы используем все 6 способов подстановки  $t_a$ ,  $t_b$  и  $t_c$  вместо  $t_1$ ,  $t_2$  и  $t_3$ , и поэтому соответствующие  $V$  всегда имеют одни и те же аргументы, причем всегда будут упорядочены «хронологически», и оператор с более ранним временем будет всегда стоять правее оператора с более поздним временем. Таким образом, мы можем написать

$$\begin{aligned} \langle f | S^{(3)} | i \rangle = & \left( -\frac{i}{\hbar} \right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_a \int_{-\infty}^{+\infty} dt_b \int_{-\infty}^{+\infty} dt_c \times \\ & \times \langle f | T \{ V_a(t_a) V_b(t_b) V_c(t_c) + V_{a'}(t_a) V_{b'}(t_b) V_c(t_c) \} | i \rangle, \end{aligned} \quad (12.14)$$

где операция временного упорядочения, или  $T$ -произведения, определяется так, что она приводит к изменению порядка следования операторных множителей в произведении, стоящем под знаком  $T$ -произведения, на хронологический порядок, т. е. такой порядок, при котором оператор с более ранним временем стоял бы всегда правее оператора с более поздним временем. Шесть возможных способов упорядочения приводят к 6 интегралам, берущимся по различным областям  $t_a$ ,  $t_b$  и  $t_c$ , причем эти области вырезаются соответствующими  $\theta$ -функциями, имеющимися в каждом из этих 6 членов, которые получаются после подстановки (12.13) в (12.10).

Выражение (12.14) можно упростить, если сделать еще одну замену переменных интегрирования. Мы можем написать

$$V_a(t_a) V_b(t_b) V_c(t_c) = e^{iH_0 t_a / \hbar} V_a e^{iH_0 (t_b - t_a) / \hbar} V_b e^{iH_0 (t_c - t_b) / \hbar} V_c e^{-iH_0 t_c / \hbar}, \quad (12.15a)$$

$$V_a(t_a) V_b(t_b) V_c(t_c) = e^{iH_0 t_b / \hbar} V_a(t_a - t_b) V_b(0) V_c(t_c - t_b) e^{-iH_0 t_c / \hbar} \quad (12.15b)$$

и рассмотреть новые переменные

$$\tau_1 = t_a - t_b, \quad (12.16a)$$

$$\tau_2 = t_c - t_b. \quad (12.16b)$$

Подставляя выражения (12.15a) и (12.15b), а также подобные выражения для  $V_{a'}$ ,  $V_{b'}$  и  $V_c$  в (12.14) и переходя к новым переменным интегрирования (12.16), получаем

$$\langle f | S^{(3)} | i \rangle = \frac{i}{\hbar^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_b e^{i(E_i - E_f)t_b/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_2 \times \\ \times \langle f | T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) + V_{a'}(\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle, \quad (12.17)$$

где  $E_i$  и  $E_f$  — собственные значения гамильтониана  $H_0$  для начального и конечного состояний, а экспоненциальный временной множитель получился от действия первого и последнего операторов в (12.15b) на состояния  $|f\rangle$  и  $|i\rangle$ .

Интегрирование по  $t_b$  приводит к  $\delta$ -функции сохранения энергии, так что из (12.17) мы получаем

$$\langle f | S^{(3)} | i \rangle = \frac{i}{\hbar^2} 2\pi\delta(E_i - E_f) \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau_2 \times \\ \times \langle f | T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) + V_{a'}(\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle. \quad (12.18)$$

До сих пор наши рассуждения были одинаково пригодны как для старого формализма теории возмущений, использующего «промежуточные, виртуальные, состояния», так и для нового формализма, использующего «промежуточные, виртуальные, частицы». Начиная с этого момента рассуждения в обоих формализмах различаются. В старом формализме надо проводить вычисление матричного элемента (12.18), вставляя в формулу везде между соседними операторами  $V$  суммы по полным наборам промежуточных состояний. Временная зависимость  $V$  от переменных  $\tau_1$  и  $\tau_2$  экспоненциальная, и при таком способе преобразования формулы (12.18) операторы  $H_0$  в показателях экспонент заменятся на собственные энергии соответствующих промежуточных состояний. После этого интегрирование по временным переменным  $\tau_1$  и  $\tau_2$  в (12.18) легко будет провести, и в результате мы получим энергетические знаменатели промежуточных состояний.

В новом формализме рассуждать надо иначе. Использовать разложения по промежуточным состояниям теперь не нужно, а нужно переставить операторы рождения и уничтожения, имеющиеся в отдельных операторах  $V$ , таким образом, чтобы рядом стояли операторы рождения или уничтожения, соответствующие одной и той же частице. После этого тоже легко провести и инте-

грирование по временным переменным; в результате появляются множители с энергетическими знаменателями, но теперь они будут пропагаторами, соответствующими различным виртуальным промежуточным частицам. Мы можем избавиться от операторов рождения и уничтожения, стоящих в произведениях  $V$  и соответствующих частицам, присутствующим в начальном и конечном состояниях, используя формулы (12.11а) и (12.11б) для начального и конечного состояний и преобразуя с их помощью матричный элемент (12.18) к виду среднего, берущегося по вакуумному состоянию, а затем используя теорему Вика для раскрытия среднего:

$$\langle f | T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \langle 0 | c_j c_k a_q T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) \} c_k^\dagger c_j^\dagger | 0 \rangle, \quad (12.19a)$$

$$\langle f | T \{ V_{a'}(\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \\ = \langle 0 | c_j c_k a_q T \{ V_{a'}(\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} c_k^\dagger c_j^\dagger | 0 \rangle. \quad (12.19b)$$

До сих пор операторы, зависящие от времени и входящие в  $T$ -произведение, были операторами  $V$ , т. е. произведениями одного бозонного оператора и двух фермионных операторов. Так как теперь мы рассматриваем отдельные антикоммутирующие друг с другом фермионные операторы рождения и уничтожения и отдельные бозонные операторы, то расширим данное выше определение  $T$ -произведения и станем его применять к произведениям отдельных фермионных операторов. При хронологическом упорядочении операторов, стоящих под знаком  $T$ -произведения, дополнительно необходимо умножать произведение операторов на знаковый множитель  $-1$  для каждой перестановки каких-либо двух фермионных операторов в произведении. Так, например,

$$T \{ c_k^\dagger(\tau) c_k(0) \} = c_k^\dagger(\tau) c_k(0) \quad \text{при } \tau \geq 0, \quad (12.20a)$$

$$= -c_k(0) c_k^\dagger(\tau) \quad \text{при } \tau < 0. \quad (12.20b)$$

Причина, почему мы должны так поступать, станет ясной позже. Чтобы раскрыть выражения (12.19), мы должны переставить зависящие от времени (коммутирующие и антикоммутирующие друг с другом) операторы. Это можно сделать, используя формулы

$$c_k^\dagger(\tau) = e^{iH_0\tau/\hbar} c_k^\dagger e^{-iH_0\tau/\hbar} = e^{iE_k\tau/\hbar} c_k^\dagger, \quad (12.21a)$$

$$c_j c_k^\dagger(\tau) = \delta_{jk} e^{iE_k\tau/\hbar} - c_k^\dagger(\tau) c_j \quad (12.21b)$$

и аналогичную формулу для перестановки соседних бозонных операторов

$$a_q a_r^\dagger(\tau) = \delta_{qr} e^{i\omega_r\tau/\hbar} + a_r^\dagger(\tau) a_q. \quad (12.21b)$$

Таким образом, получаем

$$\begin{aligned} \langle 0 | c_j A V_c(\tau_2) A' c_j^\dagger | 0 \rangle = \\ = e^{i(E_{j'} - E_j)\tau_2/\hbar} \langle 0 | A [a_r(\tau_2) g_{j'jr} + a_{-r}^\dagger(\tau_2) g_{jj'-r}^*] A' | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (12.22a)$$

где  $A$  и  $A'$  — произвольные операторы, от которых требуется только, чтобы они коммутировали с операторами  $c_j$  и  $c_j^\dagger$ . Аналогично имеем формулы

$$\langle 0 | c_k a_q B V_a(\tau_1) B' | 0 \rangle = e^{i(E_{k'} + \omega_q)\tau_1/\hbar} g_{ik'q}^* \langle 0 | B c_i(\tau_1) B' | 0 \rangle \quad (12.22б)$$

и

$$\langle 0 | a_q D V_{a'}(\tau_1) D' c_k^\dagger | 0 \rangle = e^{-i(E_k - \omega_q)\tau_1/\hbar} g_{ikq}^* \langle 0 | D c_i^\dagger(\tau_1) D' | 0 \rangle, \quad (12.22в)$$

где  $B$  и  $B'$  — произвольные операторы, коммутирующие с операторами  $c_k$  и  $a_q$ , а  $D$  и  $D'$  — операторы, коммутирующие с операторами  $c_k^\dagger$  и  $a_q$ .

Оба вакуумные средние (12.19а) и (12.19б) будут иметь в точности вид среднего (12.22а), если мы перенесем оператор  $c_k$  влево, а оператор  $c_k^\dagger$  направо через все другие операторы рождения и уничтожения, стоящие уже в правильном временном порядке под знаком  $T$ -произведения. Аналогично среднее (12.19а) можно свести к вакуумному среднему вида (12.22б), а среднее (12.19б) — к вакуумному среднему (12.22в) при всех возможных временных упорядочениях операторов в  $T$ -произведениях. Мы можем, следовательно, упростить средние (12.19а) и (12.19б), исключить операторы рождения и уничтожения с индексами  $k$ ,  $k'$  и  $q$  с помощью (12.22а)—(12.22в) и получить

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = e^{i(E_{k'} + \omega_q)\tau_1 + (E_{j'} - E_j)\tau_2/\hbar} g_{ik'q}^* \times \\ \times \langle 0 | T \{ c_i(\tau_1) V_b(0) [a_r(\tau_2) g_{j'jr} + a_{-r}^\dagger(\tau_2) g_{jj'-r}^*] c_k^\dagger | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (12.23a)$$

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_{a'}(\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = e^{i(\omega_q - E_k)\tau_1 + (E_{j'} - E_j)\tau_2/\hbar} g_{ikq}^* \times \\ \times \langle 0 | c_k T \{ c_i^\dagger(\tau_1) V_{b'}(0) [a_r(\tau_2) g_{j'jr} + a_{-r}^\dagger(\tau_2) g_{jj'-r}^*] | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (12.23б)$$

Мы можем упростить рассматриваемые выражения, если провеем (производя необходимые последовательные антикоммутации соседних операторов рождения и уничтожения) в (12.23а) оператор  $c_k^\dagger$  через оператор  $V_b$ , а в (12.23б) оператор  $c_k$  через оператор  $V_{b'}$ . Теперь, однако, нужно проявить известную осторожность при временном упорядочении операторов, потому что  $T$ -произведения состояются из отдельных фермионных операторов  $c_i(\tau_1)$  и  $c_i^\dagger(\tau_1)$ . Каждый из них, возможно, нужно поставить между операторами  $V_b$  и  $c_k^\dagger$  в (12.23а) или между операторами  $c_k$  и  $V_{b'}$  в (12.23б) в зависимости от конкретных значений временных переменных.

Оперирование фермионными операторами рождения и уничтожения приводит к необходимости учета дополнительного знакового множителя (от антикоммутирования фермионных операторов возникает  $-1$ ). Этим, собственно говоря, и объясняется, почему действительно удобно учитывать дополнительный знаковый множитель в  $T$ -произведении [см. (12.20)]. При таком определении операции  $T$ -произведения мы можем беспрепятственно проносить отдельные фермионные операторы рождения и уничтожения, т. е. последовательно переставлять их с остальными операторами рождения и уничтожения (стоящими под знаком  $T$ -произведения). Можно рассматривать эти операторы в том порядке, в каком они выписаны под знаком  $T$ -произведения, и не расставлять их в правильном хронологическом порядке. Если использовать формальное определение  $T$ -произведения, то наше соглашение о знаках (12.20) автоматически приводит к правильным знаковым множителям, которые появляются при вычислении антикоммутаторов при перестановках друг с другом операторов рождения и уничтожения в произведении. Таким образом,

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \\ = e^{i[(E_{k'} + \omega_q)\tau_1 + (E_{j'} - E_j)\tau_2]/\hbar} g_{ik'q}^* \langle 0 | T \{ c_i(\tau_1) c_i^\dagger(0) [a_r^\dagger(0) g_{ik'r}^* + \\ + a_{-r}(0) g_{ij-r}] [a_r(\tau_2) g_{j'r} + a_{-r}^\dagger(\tau_2) g_{j'j'-r}^\dagger] \} | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (12.24a)$$

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_{a'}(\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \\ = - e^{i[(\omega_q - E_k)\tau_1 + (E_{j'} - E_j)\tau_2]/\hbar} g_{k'iq}^* \langle 0 | T \{ c_i^\dagger(\tau_1) c_i(0) [a_r^\dagger(0) g_{ik'r}^* + \\ + a_{-r}(0) g_{k'i-r}] [a_r(\tau_2) g_{j'r} + a_{-r}^\dagger(\tau_2) g_{j'j'-r}^\dagger] \} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (12.24б)$$

Формулу (12.24б) можно преобразовать к виду (12.24а), если сделать замену переменной  $\tau_1 \rightarrow -\tau_1$  и воспользоваться соотношением

$$\begin{aligned} \langle 0 | T \{ c_i^\dagger(-\tau_1) c_i(0) \} | 0 \rangle = \langle 0 | T \{ c_i^\dagger(0) c_i(\tau_1) \} | 0 \rangle = \\ = - \langle 0 | T \{ c_i(\tau_1) c_i^\dagger(0) \} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (12.24в)$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_{a'}(-\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \\ = e^{i[(E_k - \omega_q)\tau_1 + (E_{j'} - E_j)\tau_2]/\hbar} g_{k'iq}^* \langle 0 | T \{ c_i(\tau_1) c_i^\dagger(0) [a_r^\dagger(0) g_{ik'r}^* + \\ + a_{-r}(0) g_{k'i-r}] [a_r(\tau_2) g_{j'r} + a_{-r}^\dagger(\tau_2) g_{j'j'-r}^\dagger] \} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (12.24г)$$

Вакуумные средние, появляющиеся в формулах (12.24), можно представить в виде произведений пар вакуумных средних: одного для бозонных и другого для фермионных операторов; поскольку вакуумное состояние — это единственное промежуточное состоя-

ние, которое можно связать с левым вакуумным состоянием фермионными операторами и с правым — бозонными операторами.

Фермионные вакуумные средние, появляющиеся в (12.24), оказываются при этом в точности теми функциями Грина, с которыми мы уже познакомились в гл. 11 [см. (11.57в)] в теории элементарных возбуждений нерелятивистских многочастичных квантовых систем,

$$G(k, \tau) = -i \langle 0 | T \{ c_k(\tau) c_k^\dagger(0) \} | 0 \rangle.$$

Фурье-образ функции Грина дается выражением

$$G(k, E) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iE\tau/\hbar} G(k, \tau) d\tau/\hbar. \quad (12.25)$$

Бозонные вакуумные средние в (12.24) тоже можно выразить через соответствующие функции Грина. Положим

$$D(q, \tau) = -i \langle 0 | T \{ \phi_q(\tau) \phi_q^\dagger(0) \} | 0 \rangle, \quad (12.26a)$$

причем входящие сюда бозонные полевые операторы определяются следующим образом:

$$\phi_q = a_q + a_{-q}^\dagger. \quad (12.26b)$$

Фурье-образ функции (12.26) дается выражением

$$D(q, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega\tau/\hbar} D(q, \tau) d\tau/\hbar. \quad (12.27)$$

Бозонные вакуумные средние, имеющиеся в (12.24), можно записать с помощью только что введенной бозонной функции Грина (12.27), если потребовать выполнения соотношения

$$g_{ikr} = g_{ki-r}^*. \quad (12.28)$$

Соотношение (12.28) действительно практически выполняется во всех случаях, представляющих физический интерес. Будем считать, что оно имеет место и в нашем случае, и используем функции Грина (11.57в) и (12.26a) для записи матричных элементов (12.24). Тогда можно написать

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_a(\tau_1) V_b(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \\ = g_{ih'q}^* g_{ki'r}^* g_{j'jr} e^{i(E_{k'} + \omega_q)\tau_1/\hbar} G(i, \tau_1) e^{i(E_{j'} - E_j)\tau_2/\hbar} D(r, \tau_2), \end{aligned} \quad (12.28a)$$

$$\begin{aligned} \langle f | T \{ V_{a'}(-\tau_1) V_{b'}(0) V_c(\tau_2) \} | i \rangle = \\ = g_{hiq}^* g_{ik'r}^* g_{j'jr} e^{i(E_k - \omega_q)\tau_1/\hbar} G(i, \tau_1) e^{i(E_{j'} - E_j)\tau_2/\hbar} D(r, \tau_2). \end{aligned} \quad (12.28b)$$

Подставляя эти матричные элементы в выражение (12.18) для  $S$ -матрицы и вспоминая определения фурье-образов функций Грина, получаем

$$\langle f | S^{(3)} | i \rangle = i2\pi\delta(E_i - E_j) [g_{ik}^* g_{k'q} g_{k'ir}^* g_{j'jr} G(i, E_{k'} + \omega_q) D(r, E_{j'} - E_j) + g_{k'iq}^* g_{ik'r} g_{j'jr} G(i, E_k - \omega_q) D(r, E_{j'} - E_j)]. \quad (12.29)$$

В выражение (12.29) входят только матричные элементы взаимодействия и функции Грина, а не матричные элементы и энергетические знаменатели, как в старой теории возмущений с «промежуточными состояниями». Мы видим, что имеется своя функция Грина для каждой виртуальной, промежуточной частицы. Связь между функциями Грина и энергетическими знаменателями легко установить, если воспользоваться теми свойствами функций Грина, которые были уже указаны в гл. 11. Функция Грина  $G(k, E)$  имеет простые полюсы при энергиях  $E$ , равных энергии каждого из элементарных возбуждений, возникающих при добавлении одной частицы, находящейся в состоянии  $k$ , к нашей системе. Для гамильтониана  $H_0$  функция Грина имеет единственный полюс при энергии  $E_k$ . Таким образом, функция  $G(i, E_{k'} + \omega_q)$  имеет знаменатель  $E_i - E_{k'} - \omega_q$ , дающий как раз этот полюс. Это в точности тот знаменатель, который мы приписывали фермиону в состоянии  $i$  и о котором говорили выше в связи с формулой (12.4г).

Из формулы (12.29) видно, что первое слагаемое в ней включает вклады, возникающие в «теории возмущений с промежуточными состояниями», от всех диаграмм фиг. 12.1, и вклады от двух дополнительных диаграмм, полученных из диаграммы фиг. 12.1,  $z$ , когда бозон  $r$  испускается из состояния  $j$  до и после испускания бозона  $q$  соответственно. То, что вклад от диаграммы фиг. 12.1,  $z$ , которая имеет дырочное или античастичное состояние  $i$ , правильно описывается выражением (12.29), можно видеть, сравнив знаменатели функции Грина с соответствующим энергетическим знаменателем. Функция Грина для дырочного возбуждения имеет полюс при отрицательной энергии  $-E$ , которая отвечает энергии элементарного возбуждения, взятой с обратным знаком, т. е. при  $-E_k$ . Таким образом,  $G(i, E_{k'} + \omega_q)$  имеет знаменатель  $E_i + E_{k'} + \omega_q$ . Это есть как раз энергетический знаменатель для первого промежуточного состояния для диаграммы на фиг. 12.1,  $z$ . Аналогично, вычисляя бозонную функцию Грина, определяемую (12.26) и (12.27), убеждаемся, что она дает энергетический знаменатель в формуле (12.6), зависящий от  $r$ .

Из формулы (12.29) видно, что второе слагаемое в ней описывает вклады от других, не рассмотренных пока что нами диаграмм, а именно от тех, для которых конечный бозон  $q$  испускается фермионом, переходящим из состояния  $k$  в промежуточное состояние  $i$ , а обменный бозон  $r$  либо испускается, либо

поглощается фермионом, переходящим из промежуточного состояния  $i$  в конечное состояние  $k'$ .

Как отмечалось выше, имеются еще и другие вклады, которые получаются из (12.29) перестановкой индексов  $k'$  и  $j'$  и индексов  $k$  и  $j$ . Их можно легко выписать, производя непосредственно перестановки индексов в формуле (12.29) и учитывая дополнительные знаковые множители  $-1$  для каждой такой перестановки, так как мы имеем дело с антикоммутационными соотношениями. В самом известном в физике процессе рассеяния электрон рассеивается нуклоном или ядром и одновременно испускает фотон. Для этого процесса указанные выше перестановки производить нельзя. Индексы  $j$ ,  $j'$ ,  $k$  и  $k'$  будут тогда относиться к частице, которая является либо электроном, либо нуклоном, а обе перестановки будут соответствовать таким переходам, в которых, например, электрон превращается в нуклон с испусканием фотона. Вклады от таких переходов, конечно, равны нулю, потому что коэффициенты  $g$  для них строго обращаются в нуль. Одновременное использование обеих обсуждаемых перестановок означало бы, что фотон испускается нуклоном, а не электроном. Хотя вклад от такого процесса и не равен нулю, однако по сравнению с вкладами от учтенных нами переходов он очень мал (из-за большого различия масс электрона и нуклона).

Обратите внимание, что в формуле (12.29) суммирование подразумевается по всем возможным промежуточным состояниям  $i$  и  $r$ . Далее, поскольку индексы  $i$  и  $r$  характеризуют состояния частиц совершенно однозначно, т. е. в них учитываются все степени свободы частиц, то в (12.29) имеются также и суммы по спинам и поляризациям. Для электронов, описываемых уравнением Дирака, функция Грина определяется так, что в ней учитываются все степени свободы электрона, т. е. в нее входят дираковские спиноры, включающие античастичные состояния. Диаграмма на фиг. 12.1,2 описывает в этом случае рождение электрон-позитронной пары.

Теперь можно сопоставить нашу простую формулу (12.29) с тем, что дает старая теория возмущений с промежуточными состояниями. Легко видеть, что каждое из двух  $T$ -произведений в (12.18) приводит к слагаемому в формуле (12.29). Если бы, исходя из формулы (12.18), мы стали использовать теорию возмущений с промежуточными состояниями (т. е. преобразовывать матричные элементы, вставляя в них в промежуток между каждой парой соседних операторов  $V$ , имеющихся в произведениях, суммы по полным наборам промежуточных состояний), то построили бы другой набор промежуточных состояний (свой для каждого способа упорядочения произведения операторов в каждом из  $T$ -произведений). Таким образом, каждое из двух слагаемых в (12.29) стало бы суммой 6 отдельных



слагаемых, если бы мы использовали старую теорию возмущений с промежуточными состояниями. Уменьшение числа членов в  $n$ -м порядке еще более существенное: оно сокращается не в 6, а в  $n!$  раз. Чтобы проиллюстрировать это обстоятельство, мы и взяли для нашего примера третий порядок теории возмущений, а не второй. Сокращение в 6 раз уже внушительное; и мы можем указать здесь две причины его: 1) в новой теории возмущений мы рассматриваем на равных основаниях все различные способы временного упорядочения промежуточных частиц; 2) мы рассматриваем на равных основаниях одновременно и частицы, и античастицы.

Простой вид формулы (12.29) и ее непосредственная связь с диаграммами приводят к следующим правилам составления вкладов от диаграмм, которые называют «фейнмановскими правилами». Они точно предписывают, как производить конкретные вычисления.

Прежде всего надо нарисовать все топологически различные диаграммы для исследуемого процесса рассеяния в данном порядке по взаимодействию. Вклад от каждой диаграммы, как это видно из формулы (12.29), есть произведение следующих множителей:

- 1) множителей  $G(k, E)$ , приписываемых виртуальным фермионным линиям;
- 2) множителей  $D(q, \omega)$ , приписываемых виртуальным бозонным линиям;
- 3) множителей  $g_{ikq}$ , приписываемых вертексам (т. е. точкам пересечения трех линий).

По всем возможным значениям индексов  $i, k, q$  и т. д. нужно провести суммирование. Аргументы функций Грина  $E, \omega$  однозначно определяются из условий, чтобы во всех вертексах диаграммы выполнялись законы сохранения энергии.

Отметим, что во вкладе от диаграммы появляется еще «знаковый» множитель, который определяется ее топологической структурой, в частности числом «замкнутых петель» виртуальных фермионных линий этой диаграммы.

Конкретный вид функций Грина определяется видом оператора  $H_0$ . Для квантовой многочастичной системы оператор  $H_0$  может быть гамильтонианом невзаимодействующего ферми-газа, или гамильтонианом модели БКШ с основным состоянием БКШ, берущимся в качестве вакуумного состояния. В релятивистской квантовой теории поля нужно обращаться к уравнению Дирака, чтобы определить вид фермионной функции Грина, а бозонную функцию Грина надо отыскивать, используя то или иное релятивистское волновое уравнение в зависимости от величины спина бозона.

В рассматриваемую диаграммную технику легко можно ввести дальнейшие важные упрощения. Одно из них связано с тем, что

вакуумное состояние  $|0\rangle$  не является собственным состоянием полного гамильтониана  $H$ , хотя оно и является собственным состоянием гамильтониана  $H_0$ . (Точное собственное состояние гамильтониана  $H$ , не содержащее частиц, называется «физическим вакуумным состоянием». Его ни в коем случае не надо путать с «невозмущенным вакуумным состоянием»  $|0\rangle$ , которое мы сейчас рассматриваем.) Для задачи рассеяния начальное и конечное состояния, строго говоря, нельзя брать в виде (12.11), так как операторы рождения должны действовать не на невозмущенное, а на *физическое* вакуумное состояние. Когда, однако, мы используем в качестве начального и конечного состояний состояния (12.11), ряд теории возмущений (12.10) будет давать не только интересующую нас матрицу рассеяния, но также и поправки к невозмущенному вакуумному состоянию. При этом оказывается, что нежелательные вакуумные поправки можно легко исключить, отбрасывая все появляющиеся в теории несвязные диаграммы, т. е. все такие диаграммы, которые можно разбить на две или более не связанных друг с другом части, не разрывая при этом никаких линий диаграммы.

Далее, диаграммная техника позволяет произвести сразу же еще одно важное упрощение. Состояние, которое получается при действии одного оператора рождения частицы на *физическое* вакуумное состояние, не будет, конечно, собственным состоянием гамильтониана  $H$ ; соответственно появятся некоторые поправочные члены, когда мы будем, отправляясь от этого состояния, строить ряд теорий возмущений (12.8). Влияние взаимодействия скажется в том, что изменится энергия рассматриваемого одночастичного состояния, т. е. «ренормируется» масса частицы, а также и в том, что волновая функция состояния преобразуется в такую, которая содержит не только «голое» однофермионное состояние, но также и состояние, описываемое «облаком виртуальных бозонов» около фермионной частицы. В теории диаграмм имеется возможность отдельно рассмотреть те диаграммы, которые ответственны за превращение «голой» частицы в «одетую», т. е. за образование «облака виртуальных бозонов и частично-дырочных пар». Эти физические, или «одетые», частицы можно затем использовать в теории рассеяния. Процедура вычисления масс и взаимодействий «одетых» частиц, основанная на свойствах «голых» частиц, называется «процедурой ренормировки». В некоторых задачах, в частности встречающихся в теории твердого тела, указанные ренормировочные множители можно вычислить и сравнить с экспериментом. Так, например, «эффективную массу» электрона, движущегося в твердом теле вместе с облаком окружающих его виртуальных фононов, можно вычислить и измерить. В других областях теоретической физики, в особенности в квантовой теории поля, ренормировочные множители нельзя ни

вычислить, ни измерить. Массу «голого» электрона, получаемую при обращении в нуль его электромагнитного поля, измерить никак нельзя, так как невозможно выключить это поле. Ренормировочный множитель, описывающий различие «голой» массы и «физической» массы, выражается суммой расходящихся интегралов в теории возмущений (такого типа, с которыми мы столкнулись в простом примере при изучении разности масс двух нейтральных каонов). Поэтому приходится использовать следующее предписание: *вычислять матричные элементы физически наблюдаемых процессов рассеяния, выражать их через свойства физических частиц, а затем исключать неизмеримые свойства «голых» частиц из всех результатов.*

#### ***§ 4. Квантовополевой способ рассуждений, или искусство рассуждать о квантовой теории поля, на самом деле детально не изучая ее***

В релятивистской квантовой теории поля исследуют процессы излучения, в которых отдельные элементарные частицы испускаются и поглощаются. Формализм вторичного квантования, как хорошо известно, первоначально был развит именно для квантования классических полей. Однако можно, конечно, ввести формализм вторичного квантования и вне всякой связи с квантованием полей, как это мы сделали в гл. 5, и описывать процессы испускания и поглощения частиц с помощью феноменологического гамильтониана взаимодействия, например гамильтонианов (4.2), (4.28), (7.12) и (12.1в). В электродинамике или в теории гравитации, в которых для квантованных полей имеются соответствующие классические поля и известны уравнения последних, процедура квантования классических полей приводит к очень интересным предсказаниям в отношении поведения квантованных полей, т. е. она позволяет построить стройную теорию непосредственно из первых принципов. Например, оказывается, можно предсказать существование элементарных частиц, которые являются квантами соответствующих полей (фотоны и гравитоны). Легко также установить точный вид гамильтониана или лагранжиана, описывающего взаимодействие этих элементарных частиц. Вместе с тем для электронов, нуклонов и мезонов, для которых мы не знаем никаких соответствующих классических полей, квантовая теория поля пытается идти в обратном направлении и искать такие классические уравнения поля, которые после их квантования приводили бы к существованию экспериментально наблюдаемых элементарных частиц. При этом мы не делаем новых предсказаний, исходя из первых принципов, а просто с самого начала постулируем в формализме вторичного квантования вид

феноменологического гамильтониана, например гамильтониана (12.1).

Рассмотрим сначала феноменологический гамильтониан (12.1). (Правда, в квантовой теории поля предпочтительно использовать лагранжианы, а не гамильтонианы, но здесь мы не будем вдаваться в такие тонкости.) Параметры  $E_k$ ,  $\omega_q$  и  $g_{ikq}$  в гамильтониане (12.1) могут быть совершенно произвольными, тогда как, если бы наш гамильтониан был получен из классической теории поля, они имели бы совершенно определенные значения или по крайней мере удовлетворяли бы определенным соотношениям. Эти ограничения могут быть трех типов: 1) следующие из принципов симметрии и инвариантности; 2) следующие из свойств классического поля, например электромагнитного поля; 3) некоторые ad hoc ограничения, как, например, требование локальности для взаимодействия квантованных полей, для которых нет соответствующих классических полей.

Если рассмотреть простой случай, когда усложнениями, связанными со спином, можно пренебречь и когда индексы  $j$ ,  $k$  и  $q$  означают просто обычные импульсы, требование сохранения импульса приведет к условию

$$k = j + q, \quad (12.30)$$

так что гамильтониан взаимодействия (12.1в) можно будет записать в более простом виде

$$V = \sum_{kq} (G_{kq} c_k^\dagger c_{k+q} a_q^\dagger + G_{kq}^* c_{k+q}^\dagger c_k a_q). \quad (12.31)$$

Гамильтониан (12.31) можно дальше упростить, если наложить на него условие галилеевой (или лоренцевой) инвариантности и условие локальности. В примерах, рассмотренных в гл. 4 и 7, требования симметрии и локальности полностью определяли вид гамильтониана взаимодействия с точностью до мультипликативной постоянной, характеризующей величину взаимодействия. В случаях когда важно учитывать спин частиц, требования сохранения момента количества движения и четности (если последняя сохраняется) ограничивают возможности спинового связывания.

Когда гамильтониан (12.1) уже написан либо на основе процедуры квантования классического поля, либо просто так ad hoc, как это было сделано выше, тогда тотчас же возникает проблема решения соответствующего уравнения Шредингера. Правда, всегда имеется еще одна экзотическая проблема: имеет ли данный гамильтониан вообще хоть какое-нибудь решение. Это, конечно, очень серьезный математический вопрос, и он занимает одно из центральных мест в современных исследованиях. Основная трудность, связанная с ним, состоит в том, что при конкретных вычислениях, проводимых главным образом с помощью тео-

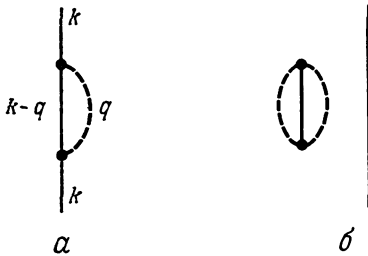
рии возмущений, появляются расходящиеся интегралы, причем до сих пор не найдено ни одного удовлетворительного способа избавления от этих неприятностей, хотя во многих конкретных случаях, например в квантовой электродинамике, было разработано несколько приемов, позволяющих получать результаты, которые можно сравнивать с экспериментом. Эти приемы оказались удивительно успешными, и с их помощью было получено прекрасное согласие теории с экспериментом. Поэтому в данной книге мы специально не будем рассматривать проблем расходимостей и предположим, что решение уравнения Шредингера всегда существует, просто его надо только найти.

Уравнение Шредингера для гамильтониана (12.1) нельзя решить точно. Вместе с тем точные собственные функции гамильтониана (12.16), т. е. волновые функции свободных частиц, можно легко построить и явным образом выписать. Они являются функциями, характеризующимися некоторыми определенными фиксированными числами заполнения бозонов и фермионов состояний плоских волн. Чтобы построить решение полного уравнения Шредингера (12.1), приходится использовать теорию возмущений, в которой взаимодействие (12.1в) считается малым возмущением. Вычисления величин, связанных с какими-либо экспериментально наблюдаемыми физическими процессами, производимые с помощью теории возмущений, характеризуются следующими общими чертами: 1) расчет любого физического процесса в низшем исчезающем порядке теории возмущений приводит, как правило, к разумному, вполне осмысленному результату [см., например, (12.29)]; 2) вычисление поправок высших порядков вносит, однако, путаницу, которая проявляется в нескольких отношениях. Во-первых, в расчетах высоких порядков возникает такое огромное количество промежуточных состояний, что учет всех нужных членов, если только не использовать методы современной теории возмущений, практически может составить содержание полновесной кандидатской диссертации. Во-вторых, в этих высоких порядках многие вклады, вычисляемые по обычным математическим рецептам, даются расходящимися интегралами. В-третьих, многие из вкладов в высоких порядках, возникающие при непосредственных расчетах по обычной теории возмущений, на самом деле не имеют никакого отношения к тем физическим процессам, которые мы стремимся исследовать, и их нужно просто отбросить.

Фейнмановский диаграммный формализм дает возможность простым образом классифицировать различные (обычно очень громоздкие) члены, возникающие в теории возмущений, и выписать их компактно на бумаге. Из диаграмм ясно видна физическая природа каждого вклада; к тому же существуют довольно простые «фейнмановские правила», которые легко позволяют вычислить

вклад от каждой данной диаграммы и указать степень расходимости связанного с ней интеграла. В фейнмановском диаграммном формализме появляется возможность исключать определенные классы неинтересных диаграмм и тем самым отбросить огромное количество ненужных вкладов, не имеющих никакого отношения к исследуемому нами физическому процессу.

Возникающие в теории возмущений трудности можно очень хорошо проиллюстрировать на простом примере расчета энергии однофермионного состояния, т. е. на решении уравнения Шредингера для одной свободной частицы, а более точно — для одного фермиона. Невозмущенная энергия этого состояния просто равна  $E_k$ .



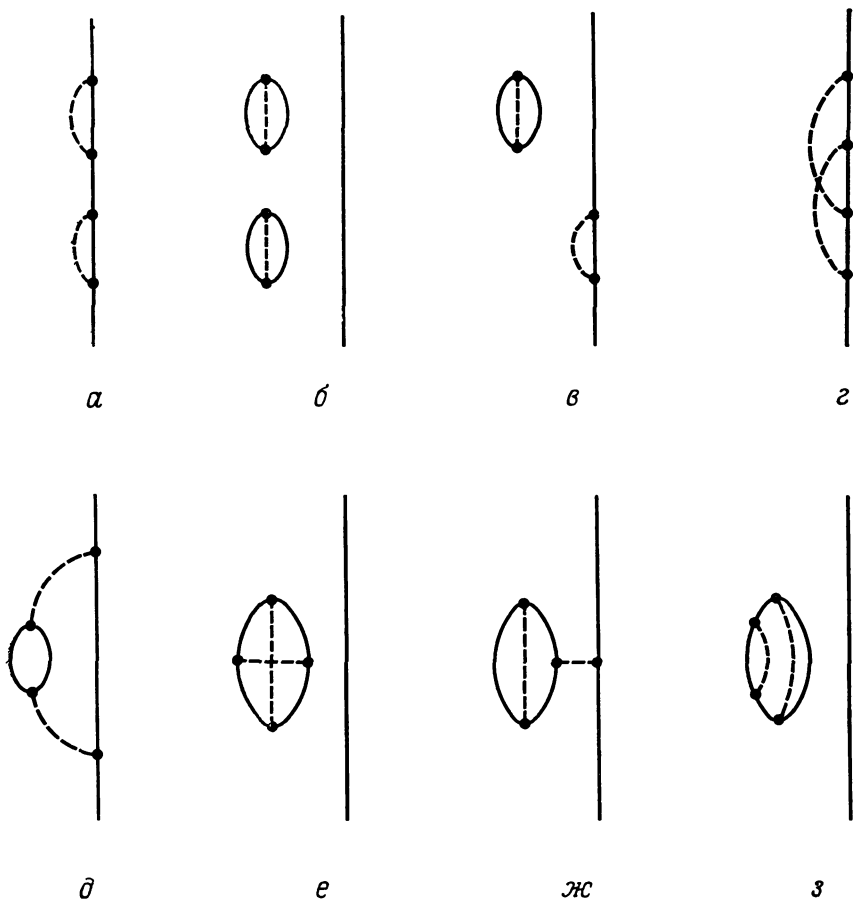
Фиг. 12.2.

Однако, конечно, имеются поправки к ней, обусловленные взаимодействием. Представим себе, что поправки мы станем вычислять по теории возмущений. Так как взаимодействие (12.1в) либо добавляет один бозон к системе, либо снимает его от нее, то для всех состояний с одним фермионом и фиксированным числом бозонов диагональные матричные элементы взаимодействия (12.1в) равны нулю. Поэтому у нас не будет никакого вклада первого порядка в энергию рассматриваемого однофермионного состояния. Во втором порядке теории возмущений поправка, конечно, появится. При этом промежуточное состояние во втором порядке должно быть в частности таким, в котором будет один наш фермион и один испущенный им бозон. Соответствующий вклад второго порядка будет иметь два матричных элемента взаимодействия и изображаться диаграммой, представленной на фиг. 12.2, а. На этой диаграмме фермион испускает бозон, а затем его же поглощает. Кроме процесса, изображенного на фиг. 12.2, а, возможен еще один процесс второго порядка, изображенный на фиг. 12.2, б. Теперь с фермионом, который мы рассматриваем, ничего не происходит. Бозон испускается и поглощается при одновременном рождении и аннигиляции фермион-антифермионной пары. Можно показать, что приведенные диаграммы двух типов единственные, которые представляют интересующую нас поправку второго порядка к энергии однофермионного состояния.

Рассмотрим теперь процессы в более высоких порядках теории возмущений. Легко видеть, что ненулевые вклады в энергию однофермионного состояния дают только процессы *четного* порядка, поскольку любой испущенный бозон должен обязательно поглощаться, чтобы наша система осталась в первоначальном состоя-

нии. Легко видеть, что ненулевые вклады в энергию однофермионного состояния дают только процессы *четного* порядка, поскольку любой испущенный бозон должен обязательно поглощаться, чтобы наша система осталась в первоначальном состоя-

нии. Таким образом, от процессов второго порядка нам сразу надо перейти к изучению процессов четвертого порядка, в которых испускаются два бозона и поглощаются два бозона. Имеется много различных диаграмм, соответствующих этому процессу; все они показаны на фиг. 12.3.



Фиг. 12.3.

Чтобы вычислить вклад от данной диаграммы, нужно прежде всего аккуратно выписать все матричные элементы взаимодействия (12.1в), соответствующие вертексам данной диаграммы. Далее нужно выписать все пропагаторы, отвечающие промежуточным частицам. После этого надо составить из этих величин произ-

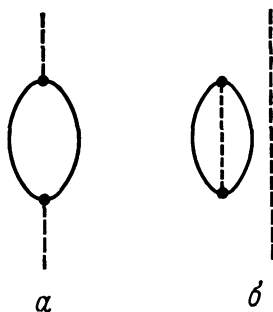
ведение и затем провести суммирование его по всем возможным значениям импульсов промежуточных виртуальных частиц данной диаграммы. Например, для диаграммы, изображенной на фиг. 12.2, *a*, предположим, что наше рассматриваемое однофермионное состояние имеет импульс  $\hbar k$ . Тогда промежуточными частицами будут бозон с импульсом  $\hbar q$  и фермион с импульсом  $\hbar (k - q)$ . Вклад от этой диаграммы получается путем суммирования соответствующего ей произведения матричных элементов и пропагаторов по всем возможным значениям  $q$ ; суммирование приводит к характерной «ультрафиолетовой» расходимости в случае квантовой электродинамики, получающейся от того, что для бозона с большим значением импульса  $q$  имеется больший объем фазового пространства. Принимая во внимание конкретный вид матричных элементов гамильтониана взаимодействия (12.1в) и конкретный вид пропагаторов, легко установить, какая степень  $q$  появляется в подынтегральном выражении в матричном элементе перехода, описываемого рассматриваемой нами сейчас диаграммой, изображенной на фиг. 12.2, *a*. Если эта степень  $q$  достаточно большая, то интеграл будет расходиться при больших значениях  $q$ . Так на самом деле и получается для соответствующего процесса в квантовой электродинамике, при котором электрон испускает и поглощает фотон.

Вклады от процессов, изображенных диаграммами на фиг. 12.2 и фиг. 12.3, оказываются расходящимися в большинстве квантовых теорий поля и, в частности, в квантовой электродинамике. Вполне резонно спросить поэтому, а в чем же физический смысл этих расходимостей. Величина, которую мы сейчас рассматриваем, есть энергия однофермионного состояния, или, другими словами, масса фермиона. Разумеется, масса — физически вполне определенная величина, которую несомненно можно измерить экспериментально. Тем не менее вклады от диаграмм, изображенных на фиг. 12.2 и 12.3, а также от многих других диаграмм, формально возникающих в теории возмущений для энергии однофермионного состояния, не связаны ни с какой экспериментально измеримой физической величиной. Дело в том, что вклады от этих диаграмм дают не полную массу, а поправку к массе фермиона, которая получается от учета взаимодействия (12.1в). Поправка к массе равна разности между «физической», т. е. экспериментально измеренной массой фермиона и его «голой» массой, входящей в невозмущенный гамильтониан (12.1б). «Голую» массу, разумеется, нельзя измерить ни в каком эксперименте. Взаимодействие (12.1в), конечно, всегда присутствует в природе, и поэтому абсолютно невозможно определить, какой была бы масса фермиона, если бы это взаимодействие было выключено. Разумеется, говорить можно о «голой», или «механической», массе электрона и об его «электромагнитной» массе, в которой учтен вклад от взаимодей-



ствия электрона с его электромагнитным полем, а измерить экспериментально можно лишь *полную* массу электрона, так как нет никаких способов экспериментально разделить «голую» и «электромагнитную» составляющие массы. Таким образом, можно сказать, что расходимости, возникающие от вкладов диаграмм, изображенных на фиг. 12.2 и 12.3, *не связаны с экспериментально наблюдаемыми физическими величинами и поэтому не важны.*

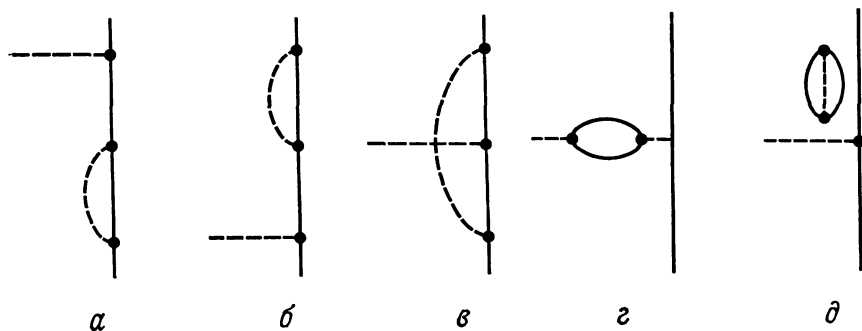
Подобного рода заключение можно сделать и в отношении поправки, вычисляемой по теории возмущений, к энергии однобозонного состояния. Во втором порядке для этой поправки мы имеем диаграммы, представленные на фиг. 12.4. Мы снова можем сказать, что вклады от указанных диаграмм не связаны с экспериментально наблюдаемой величиной. Они описывают разность масс «физического» и «голого» бозонов, причем последнюю нельзя экспериментально измерить.



Фиг. 12.4.

Рассмотрим теперь процесс испускания фермионом бозона. Его надо представлять себе как квантовый переход из начального состояния, в котором имеется один фермион, в конечное состояние, в котором имеются один фермион и один бозон. Диаграмма первого порядка теории возмущений представляется просто одним вертексом. Следующие поправки возникают только в третьем порядке, и они связаны с процессами испускания и поглощения второго, виртуального бозона. Соответствующие диаграммы изображены на фиг. 12.5. Здесь снова мы сталкиваемся с расходимостями во вкладах от диаграмм, относительно которых можем тоже сделать заключение, что они не важны. Вероятность квантового перехода, состоящего в испускании фермионом бозона, пропорциональна силе взаимодействия или константе связи бозона с фермионом. Снова можно рассмотреть нефизическую «голую» константу связи, которая входит в гамильтониан (12.1в), и «физическую» константу связи, которая в действительности измеряется экспериментально. И опять нет никакого экспериментального способа, который позволил бы определить величину «голой» константы связи. Диаграммы теории возмущений типа показанных на фиг. 12.5 описывают только разность значений «физической» и «голой» констант связи или «физического» и «голого» электрических зарядов в случае квантовой электродинамики. Эти разности не являются физическими измеримыми величинами.

Пока что мы рассмотрели простейшие процессы, возможные в теории возмущений, представили их диаграммами и обнаружили, что они на самом деле не соответствуют никаким реальным физическим процессам. Как указывалось, они дают вклады в *разности* между физически измеримыми величинами и неизмеримыми «голыми» их значениями; последние появляются в теории в результате того, что мы пользуемся совершенно конкретным разбиением истинного гамильтониана на невозмущенный гамильтониан и гамильтониан взаимодействия. Рассмотрим теперь простейший процесс в теории возмущений, который соответствует реальному физическому процессу, т. е. тому, что можно действительно измерить в лаборатории, а именно исследуем процесс рассеяния бозона на фермионе (т. е., в частности, процесс комптоновского рассеяния в случае квантовой электродинамики). Этот процесс может

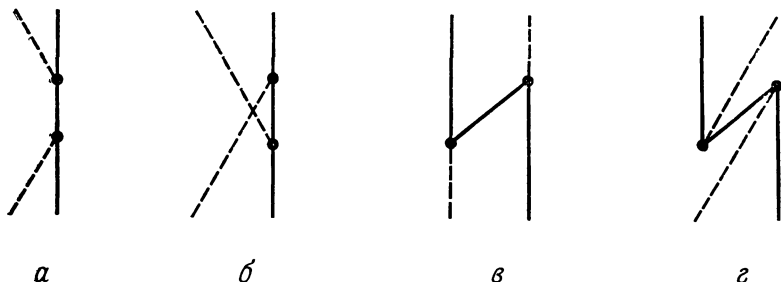


Фиг. 12.5.

появиться только начиная со второго порядка, так как связан с изменением состояния бозона, т. е. необходимо иметь два акта — акты испускания и поглощения бозона. Диаграммы процессов теории возмущений, имеющих во втором порядке, показаны на фиг. 12.6. Если провести вычисления вкладов от всех этих диаграмм в случае квантовой электродинамики, то мы придем к известной формуле Клейна — Нишины. [При сравнении этой формулы с экспериментом выяснилось, что она не совсем удовлетворительна, и для получения согласия с экспериментом необходимо учитывать вклады состояний частиц с отрицательной энергией (т. е. рождение виртуальных электрон-позитронных пар).]

Рассмотрим теперь поправки следующего более высокого порядка (четвертого) в матричный элемент комптоновского рассеяния. На фиг. 12.7 показаны диаграммы, которые необходимо при этом учесть. Вычисление этих поправок с помощью обычной тео-

рии возмущений, в которой приходится рассчитывать каждый член отдельно, очевидно, очень трудное, не говоря даже о расходимостях некоторых из получаемых интегралов. Здесь мы имеем пример того, о чем говорилось выше: процесс, вероятность которого мы можем физически измерить в лаборатории, легко рассчитывается с помощью теории возмущений, но взятой только в самом

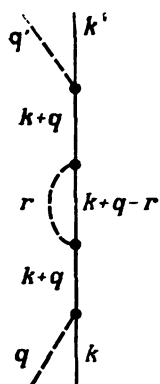


Фиг. 12.6.

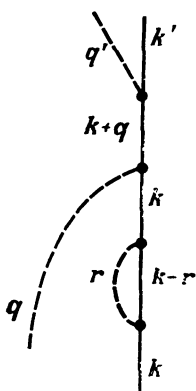
низком исчезающем порядке. Получается вполне осмысленный результат; вместе с тем учет вкладов более высоких порядков в этот процесс приводит к путанице.

Посмотрим теперь, в чем она заключается и как с ней разобратся. Простейшее возможное состояние нашей системы, а именно вакуумное состояние, соответствует такому невозмущенному состоянию свободного гамильтониана (12.16), в котором нет ни одного фермиона и ни одного бозона. Если мы теперь попытаемся рассчитать энергию этого состояния, а также изучить и другие его свойства с помощью теории возмущений, то увидим, что во втором порядке мы должны будем учесть вклад только от одной диаграммы, показанной на фиг. 12.8. В более высоких порядках появятся также и другие диаграммы, и вклады от всех их дадут разность между энергией «голого» нефизического вакуумного состояния и энергией «истинного» физического вакуумного состояния. Снова мы экспериментально не в состоянии определить, что же такое представляет собой «голое» вакуумное состояние, а также в чем состоит различие между «голым» и «физическим» вакуумными состояниями.

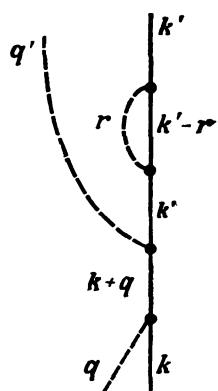
Отметим, что диаграммы такого вида, как на фиг. 12.8, уже появлялись у нас в виде составных частей ранее рассмотренных диаграмм; например, диаграмма на фиг. 12.8 входит как составная часть в диаграмму на фиг. 12.2, б. Теперь мы можем интерпретировать диаграмму, представленную на фиг. 12.2, б, по-новому, а именно как диаграмму, описывающую процесс невозмущенного движения фермиона, сопровождаемый совершенно не связанной



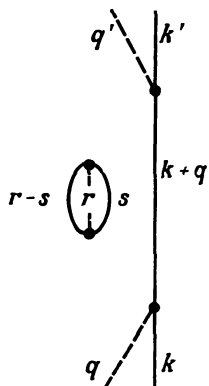
a



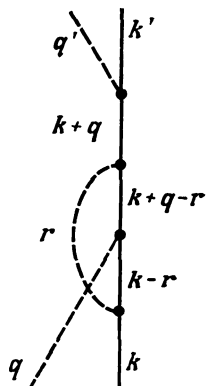
б



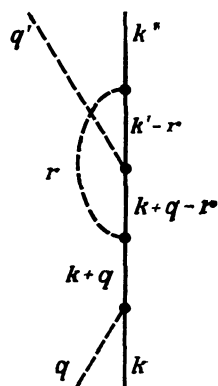
в



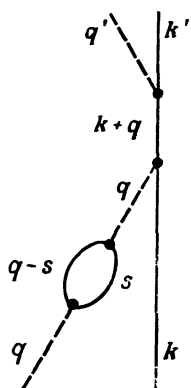
г



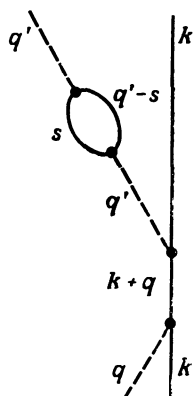
д



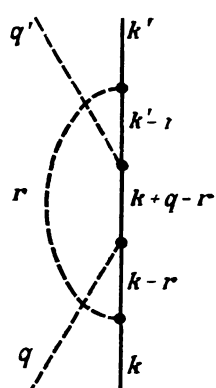
е



ж

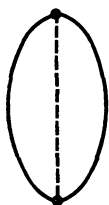


з



и

с ним «вакуумной флуктуацией», в которой была рождена одновременно с бозоном виртуальная фермион-антифермионная пара, а затем эта фермион-антифермионная пара и этот бозон вместе аннигилировали. Соответствующая вакуумная диаграмма, отдельно изображенная на фиг. 12.8, как мы уже сказали выше, дает вклад в разность энергий «физического» и «голового» вакуумного состояний. На самом деле она *не имеет никакого отношения*



Фиг. 12.8



Фиг. 12.9.

к свойствам рассматриваемого физического фермиона, и поэтому мы можем вообще отбросить диаграмму, изображенную на фиг. 12.2, б при изучении энергии, или массы этого фермиона. Рассматриваемая диаграмма связана с различием «голового» и «физического» вакуумных состояний и не имеет абсолютно никакого отношения к данному процессу. Аналогично рассуждая, мы можем отбросить диаграммы, изображенные на фиг. 12.3, б, е, з, 12.4, б, 12.5, д и 12.7, г. (С подобным пренебрежением «несвязными» диаграммами мы встречаемся уже в теории возмущений в нерелятивистской проблеме многих частиц.) Строго математически обосновать процедуру отбрасывания диаграмм, конечно, можно, но это вопросы, которые относятся к теории поля, а не к «квантово-полевому способу рассуждений», который мы сейчас излагаем. (Речь идет об аналоге в квантовой теории поля теоремы Голдстоуна из квантовой теории многочастичных систем; теорема в квантовой теории поля на самом деле была предшественницей теоремы Голдстоуна.)

Разобраться в описываемой путанице помогает также и то важное наблюдение, что все диаграммы, которые еще сохранились на фиг. 12.2 и 12.3, имеют общий вид диаграммы, показанной на фиг. 12.9, на которой заштрихованный овал изображает всю совокупность диаграмм, которые можно подставить вместо него. Хотя мы и не знаем способа, как вычислить сумму вкладов от всех диаграмм, изображенных диаграммой с овалом на фиг. 12.9, но мы знаем, чем должна быть эта сумма, а именно «физической» массой фермиона. Таким образом, при вычислении вкладов от

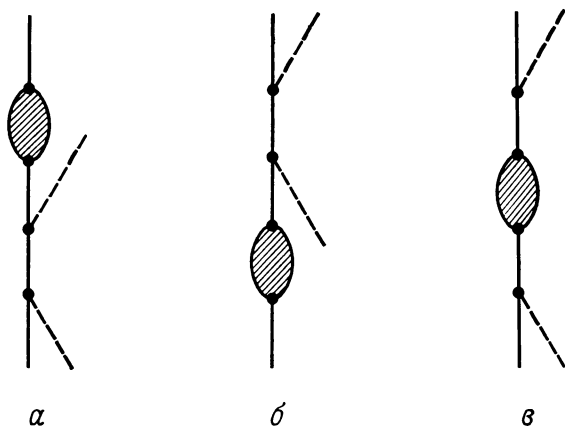
процессов, имеющих в теории возмущений и представляющих реальные физические процессы, мы можем отбросить вклады от всех диаграмм, имеющих вид показанных на фиг. 12.2 и 12.3, а также от диаграммы общего вида, показанной на фиг. 12.9. Сумма вкладов последних диаграмм есть просто разность между физически наблюдаемой массой фермиона, т. е. его «физической» массой и его «голой» массой, которая только и входит в невозмущенный гамильтониан (12.1 б). Мы можем рассматривать также диаграммы, соответствующие нужной нам диаграмме, просто изображая новыми линиями ее фермионы, которые теперь имеют физическую, а не «голую» массу.

Рассмотрим теперь вклад от диаграммы для комптоновского рассеяния, показанной на фиг. 12.7, б. Эта диаграмма является простой комбинацией фермионной «собственно энергетической» диаграммы, изображенной на фиг. 12.2, а, и комптоновской диаграммы второго порядка, изображенной на фиг. 12.6, а. Две эти диаграммы просто продолжают одна другую. Рассмотрим далее вклады от всего множества сходных с данной диаграммой других диаграмм, которые показаны на фиг. 12.10, б, т. е. таких диаграмм, в которых к простейшей комптоновской диаграмме на фиг. 12.6, а добавлены в начальную фермионную линию самого общего вида «собственно энергетические» диаграммы. Аналогично диаграммы, изображенные на фиг. 12.7, в и на фиг. 12.7, а, являются комбинациями простой комптоновской диаграммы, изображенной на фиг. 12.6, а, и фермионной «собственно энергетической диаграммы», изображенной на фиг. 12.2, а, включенной в конечную и промежуточную фермионные линии соответственно. Мы можем расширить класс всех этих диаграмм, как показано на фиг. 12.10, б и 12.10, в, т. е. рассмотреть диаграммы с фермионными собственно энергетическими вставками самого общего типа, которые изображаются диаграммой с овалом, как на фиг. 12.9, причем они по-разному включаются в диаграмму второго порядка, изображенную на фиг. 12.2, а. Эти диаграммы, приведенные на фиг. 12.10, характеризуют разности масс «физических» и «голых» фермионов в начальном, конечном и промежуточном состояниях; мы можем вообще отбросить все эти диаграммы, если договоримся использовать наблюдаемую физическую массу для каждого из этих трех фермионов.

Приведенное нами весьма правдоподобное рассуждение нельзя, конечно, считать строгим доказательством того, что процедура суммирования всех диаграмм типа показанных на фиг. 12.10, действительно эквивалентна процедуре замены «голой» фермионной массы на наблюдаемую «физическую» массу. Формальное математическое доказательство утверждения, что суммирование всех диаграмм типа показанных на фиг. 12.9 действительно эквивалентно процедуре ренормировки массы фермиона, можно провести

во всех подробностях, и оно входит важной составной частью в современную квантовую теорию поля.

При «ренормализационном» подходе в формулы, окончательно получаемые в первом исчезающем порядке теории возмущений, подставляют физические величины, измеряемые экспериментально, и совершенно не тревожатся о тех бесконечно больших значениях ненаблюдаемых «голых» величин, которые можно было бы экспериментально определить только в том гипотетическом случае, если бы можно было выключить взаимодействие. В некоторых тео-



Фиг. 12.10.

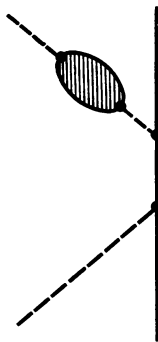
риях (например в квантовой электродинамике) все формулируется в терминах физически наблюдаемых масс и зарядов и при этом получаются разумные результаты для всех физических процессов, таких, как рассмотренное выше комптоновское рассеяние. Вместе с тем все ренормализационные постоянные, связывающие значения «голых» и «физических» величин, оказываются бесконечными. Причина появления этих бесконечностей в теории пока что не выяснена. (Это нерешенная проблема квантовой электродинамики.) Может оказаться, что бесконечности на самом деле ложные и просто возникают из-за использования математически неправильного метода вычислений, т. е. теории возмущений, но, может быть, имеются более глубокие причины их появления. Нам остается только надеяться, что будущее развитие квантовой теории поля позволит разрешить эту проблему.

С помощью описанной ренормализационной процедуры можно исключить из рассмотрения все диаграммы, имеющие вид диаграмм, показанных на фиг. 12.4, или вид более общей диаграммы, показанной на фиг. 12.11. Последняя диаграмма представляет

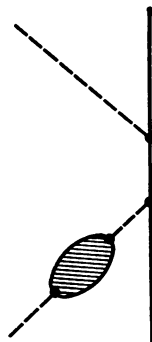
«бозонные собственно энергетические» диаграммы; ее можно просто заменить на одну новую бозонную линию для бозона с экспериментально измеренным значением массы. В случае квантовой электродинамики, в которой бозон имеет массу, строго равную нулю, соображения калибровочной инвариантности позволяют отбросить многие диаграммы вида изображенной на фиг. 12.11. (Такие диаграммы нужно, однако, отбрасывать просто на основании соображения ренормировки бозонной массы.) Диаграммы на фиг. 12.7, ж и 12.7, з для комптоновского рассеяния содержат вставки бозонных



Фиг. 12.11.



а



б

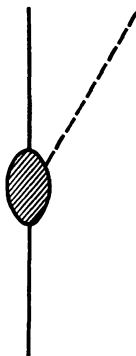
Фиг. 12.12.

собственно энергетических диаграмм. Эти диаграммы вместе с более общими диаграммами, показанными на фиг. 12.12, нужно отбросить, так как все они эквивалентны одной простой диаграмме второго порядка, изображенной на фиг. 12.6, а, в которой в обе фотонные линии введены собственно энергетические поправки.

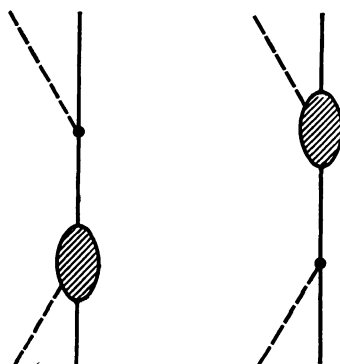
Рассмотрим теперь «вертексные» диаграммы, изображенные на фиг. 12.5. Все они, кроме диаграммы на фиг. 12.5, в, являются комбинированными диаграммами, построенными из простого вертекса и фермионной или бозонной собственно энергетических диаграмм или диаграммы, описывающей вакуумную флуктуацию. Диаграмма на фиг. 12.5, в является поправочной диаграммой второго порядка к простому вертексу. Всю совокупность диаграмм вида диаграмм на фиг. 12.5 мы представляем диаграммой, изображенной на фиг. 12.13, которая представляет наиболее общую вертексную диаграмму. Снова сумма вкладов всех указанных диаграмм просто равна разности значений констант взаимодействия, характеризующих экспериментально наблюдаемый процесс испускания или поглощения бозона фермионом и процесс испускания или поглощения, описываемый в первом порядке теории возму-



щений с использованием «голого» взаимодействия. Следовательно, мы можем не рассматривать все такие диаграммы, которые имеют сложные вертексы вроде показанного на фиг. 12.13, так как можем заменять суммы всех таких диаграмм просто диаграммами с новыми вертексами, для которых следует теперь использовать экспериментально наблюдаемые значения константы взаимодействия, или константы связи. Так мы приходим к процедуре «ренормировки



Фиг. 12.13.



Фиг. 12.14.

заряда» фермиона, совершенно аналогичной описанной выше процедуре ренормировки его массы. В случае комптоновского рассеяния мы видим, что диаграммы на фиг. 12.7, *д* и 12.7, *е* нужно скомбинировать с диаграммами более общего вида, показанными на фиг. 12.14, причем вклады от всех указанных диаграмм надо заменить просто на комптоновскую диаграмму второго порядка, изображенную на фиг. 12.6, *а*, но только теперь в этой диаграмме надо использовать физически наблюдаемое значение константы связи (или заряда) для обоих вертексов диаграммы.

Таким образом, процедура ренормировок позволяет нам ограничиться рассмотрением только очень небольшого числа комптоновских диаграмм четвертого порядка из тех, которые показаны на фиг. 12.7. Правда, при этом мы должны в комптоновскую диаграмму второго порядка, изображенную на фиг. 12.6, *а*, ввести значения физических масс для фермионов и бозонов и физической константы связи. Единственная диаграмма среди диаграмм, представленных на фиг. 12.7, которая не исключается процедурой ренормировок, это диаграмма, изображенная на фиг. 12.7, *и*. Она, как оказывается, дает *конечный*, вполне разумный вклад.

Внимательно рассматривая диаграммы на фиг. 12.7, мы видим, что только одна из них, а именно «неприводимая» диаграмма, изображенная на фиг. 12.7, *и*, ведет себя лучше в отношении расходимостей, чем любая другая «приводимая» диаграмма на фиг. 12.7, содержащая собственно энергетические или вертексные вставки. Диаграммы, изображенные на фиг. 12.7, *а*, *б*, *и*, — все являются простой комптоновской диаграммой второго порядка, показанной на фиг. 12.6, *а*, в которую вводится дополнительный второй бозон; он может испускаться и затем поглощаться. Этого бозона нет в начальном или конечном состоянии, так что его импульс нам не известен а priori. Он является виртуальным, промежуточным бозоном и поэтому может иметь любое значение импульса, ограниченное лишь одним условием: импульсы фермионов в промежуточных состояниях должны принимать такие значения, чтобы удовлетворялись законы сохранения импульсов в вертексах. Таким образом, необходимо проводить суммирование по всем возможным значениям импульса виртуального бозона.

Степень расходимости интеграла, берущегося по импульсу виртуального бозона, определяется наивысшей степенью этого импульса в подынтегральном выражении. Зависящие от импульса множители возникают от множителя фазового объема для данного бозона и, возможно, от обеих вертексных функций, когда коэффициенты взаимодействия  $G_{kq}$  в гамильтониане (12.31) зависят от  $q$ . Множители  $G_{kq}$  совершенно одинаковые, для всех трех диаграмм на фиг. 12.7, *а*, *б*, *и*. Импульс виртуального бозона, кроме того, появляется в пропагаторах для бозона и для всех остальных частиц, импульсы которых выражаются через импульс виртуального бозона (в силу законов сохранения импульса, выполняющихся в вертексах диаграмм). Таким образом, степень расходимости рассматриваемого интеграла определяется отношением степеней импульса, появляющихся в числителе (из-за фазового объема и вертексных функций) и в знаменателе (из-за пропагаторов). Все диаграммы, изображенные на фиг. 12.7, содержат каждая один бозонный пропагатор и три фермионных пропагатора, соответствующих «внутренним» линиям рассматриваемых диаграмм. Импульсы всех четырех линий оказываются для каждой диаграммы вполне определенными функциями начальных и конечных импульсов  $k$ ,  $q$  и  $k'$ ,  $q'$ , а также бозонного и фермионного импульсов  $r$  и  $s$ . Эти функции получаются в результате учета законов сохранения импульса, налагаемых на импульсы промежуточных частиц в каждом вертексе диаграммы. Каждая линия, импульс которой зависит только от  $k$ ,  $q$ ,  $k'$  и  $q'$ , имеет в качестве пропагатора некоторую постоянную; последнюю можно вообще вынести за знак интеграла, берущегося по импульсам промежуточных частиц. Все линии, импульсы которых действительно зависят от  $r$  и  $s$ , имеют пропагаторы, содержащие переменную интегрирования в

знаменателе, что, несомненно, улучшает условия сходимости интеграла. Таким образом, диаграмма, изображенная на фиг. 12.7, *и*, дает наименее расходящийся вклад по сравнению с остальными диаграммами на фиг. 12.7, так как в ней интегрирование ведется по одной переменной  $r$  и так как все четыре пропагатора для нее содержат это  $r$ .

Некоторые квантовые теории поля, например квантовая электродинамика, обладают обсуждаемым сейчас «свойством ренормируемости». В них, используя процедуру ренормировки, можно получить разумные физические результаты для экспериментально наблюдаемых величин, хотя ренормировочные множители и оказываются бесконечными. Имеются, однако, и другие квантовые теории поля, для которых недостаточно процедуры ренормировки и в которых существуют диаграммы, оказывающиеся расходящимися даже после ренормировки. Вопрос о том, как работать с такими теориями, остается все еще открытым.

### *§ 5. Теория полярона — простейший пример квантовой теории поля в физике твердого тела*

Полярон — это электрон, движущийся в поляризуемом кристалле. Динамику такой сложной квантовой системы обычно рассматривают с помощью методов квантовой теории поля; тем самым теория полярона представляет собой поучительный пример квантовой теории поля. Начнем с того, что математически опишем малые колебания ионов в гармоническом кристалле около их положения равновесия. Ими мы занимались в гл. 3 и в § 15 гл. 8. Пусть  $q(x)$  означает координату, характеризующую отклонение иона от положения равновесия. Этот ион находится в узле кристаллической решетки, имеющем координату  $x$ . Таким образом, переменная  $x$  принимает только дискретное множество значений, которые являются координатами узлов решетки рассматриваемого кристалла. По этой причине переменная  $x$  не является динамической переменной. Это просто индекс, нумерующий отдельный ион, смещение которого равно  $q(x)$ . Перейдем теперь от переменных  $q(x)$  и канонически сопряженных с ними импульсов  $p(x)$  к нормальным координатам колебаний решетки, как это мы делали в гл. 3 и в § 15 гл. 8. Как и в § 15 гл. 8, используем трансляционную симметрию задачи и пренебрежем поверхностными, т. е. «концевыми», эффектами в кристалле. Как обычно, выставим формальное требование, чтобы выполнялись периодические условия на границах кристалла. Обозначим оператор трансляции на решеточный вектор  $a$  через  $T_a$ . Координаты и импульсы ионов преобразуются

при этой трансляции по формулам

$$T_a q(x) T_a = q(x+a), \quad (12.32a)$$

$$T_a p(x) T_a = p(x+a). \quad (12.32b)$$

Отметим, что наша операция трансляции не сдвигает динамическую переменную на величину  $a$ , как в проблеме одной или многих частиц. Поскольку  $x$  выступает здесь просто как индекс, то операция трансляции не может сдвигать значения координаты  $q$  иона, а *просто изменяет значение индекса иона*: она перемещает ион, который находился в узле решетки  $x$  в узел решетки  $x+a$ .

Состояние кристалла мы должны описывать сложной волновой функцией, зависящей от всех переменных  $q(x)$ . Переменные нормальных колебаний являются собственными векторами оператора трансляции [см. (12.32)], как и в одномерном случае, рассмотренном в § 15 гл. 8. В трехмерном случае, однако, нужно приписывать определенную поляризацию каждому нормальному колебанию. Таким образом, имеем

$$\xi_{k\alpha} = \frac{1}{N} \sum_x e^{-ik \cdot x} q_\alpha(x), \quad (12.33a)$$

$$\pi_{k\alpha} = \frac{1}{N} \sum_x e^{-ik \cdot x} p_\alpha(x), \quad (12.33b)$$

$$T_a \xi_{k\alpha} T_a = \frac{1}{N} \sum_x e^{-ik \cdot x} q_\alpha(x+a) = e^{ik \cdot a} \xi_{k\alpha}, \quad (12.33в)$$

$$T_a \pi_{k\alpha} T_a = e^{ik \cdot a} \pi_{k\alpha}. \quad (12.33г)$$

Здесь  $N$  — нормировочный множитель, а индекс  $\alpha = 1, 2, 3$  характеризует одну из трех возможных поляризаций соответствующего нормального колебания. Поляризацией мы не будем особо интересоваться в дальнейшем и поэтому ниже опустим индекс  $\alpha$ .

Операторы  $\xi_k$  и  $\pi_k$ , определенные формулами (12.33), не являются эрмитовыми. Они удовлетворяют, однако, соотношениям

$$\xi_k = \xi_{-k}^\dagger, \quad (12.34a)$$

$$\pi_k = \pi_{-k}^\dagger, \quad (12.34б)$$

$$[\xi_k, \pi_{-k'}] = i\hbar \delta_{kk'}. \quad (12.34в)$$

Нормальные колебания, которые характеризуются этими переменными, представляют собой *бегущие волны*. Можно также легко построить соответствующие эрмитовы операторы, характеризующие нормальные колебания, которые являются *стоячими волнами*,

подбирая линейные комбинации <sup>1)</sup> операторов  $\xi_k$  и  $\xi_{-k}$  и операторов  $\pi_k$  и  $\pi_{-k}$ .

Как и для (8.128), преобразование (12.33) к нормальным колебаниям позволяет «разделить» переменные и привести ионный гамильтониан к сумме несвязанных друг с другом гамильтонианов гармонических осцилляторов, т. е. представить его в виде

$$H_I = \sum_k \left( \frac{\pi_k \pi_{-k}}{2M} + \frac{M\omega_k^2}{2} \xi_k \xi_{-k} \right), \quad (12.35a)$$

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_k \hbar\omega_k (a_k^\dagger a_k + a_k a_k^\dagger) = \sum_k \hbar\omega_k \left( a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right). \quad (12.35b)$$

Здесь  $\omega_k$  — частота нормального колебания  $k$ ,  $M$  — масса иона,  $a_k^\dagger$  и  $a_k$  — обычные операторы рождения и уничтожения нормальных колебаний, т. е.

$$a_k^\dagger = \frac{1}{2M\hbar\omega_k} (\pi_k + iM\omega_k \xi_k), \quad (12.36a)$$

$$a_k = \frac{1}{2M\hbar\omega_k} (\pi_{-k} - iM\omega_k \xi_{-k}). \quad (12.36b)$$

Общее число нормальных координат равно полному числу ионов, имеющих в кристалле, и поэтому конечно. Таким образом, имеется конечное число допустимых значений, которые может принимать волновой вектор  $k$  нормального колебания. Поскольку амплитуда волны определена только на дискретном множестве точек решетки, волны, длина которых меньше минимального расстояния между двумя ионами в решетке, не имеют никакого физического смысла. Следовательно, существует верхний предел возможных значений  $k$  или нижний предел возможных длин волн нормальных колебаний.

Следует обратить внимание на сходство гамильтониана (12.35b) с гамильтонианом (12.16) для свободного бозонного поля. Оно объясняет, почему многие проблемы физики твердого тела по-

<sup>1)</sup> Стоячие волны удовлетворяют самым обычным уравнениям движения для нормальных колебаний. В них все координаты  $q$  ( $x$ ) пропорциональны одной и той же амплитуде, которая периодически меняется со временем. В бегущих волнах, напротив, колебания различных  $q$  ( $x$ ) не согласованы друг с другом по фазе. Бегущие волны формально нужно описывать, задавая амплитуду и фазу, которые однозначно характеризуют действительную и мнимую части периодически изменяющейся со временем комплексной амплитуды. Таким образом, бегущие волны в классической механике представляются комплексными динамическими переменными и поэтому в квантовой механике описываются незермитовыми операторами, удовлетворяющими соотношениям вида (12.34).

добны проблемам квантовой теории поля и наоборот<sup>1)</sup>. Вместе с тем следует отметить, что в теории поля нет никаких расходимостей, присущих квантовым теориям поля, так как значения  $k$  с самого начала уже ограничены верхним пределом. В теории возмущений, в которой рассматриваются процессы испускания и поглощения решеточных бозонов, или «фононов», как их обычно называют, имеется верхняя граница значений волновых векторов фононов. Никаких расходимостей поэтому никогда не возникает, когда интегрирование ведется по всем значениям волновых векторов какого-либо виртуального фонона.

Одна характерная для квантовой теории поля бесконечность уже появилась у нас в формуле (12.35б), а именно «нулевая энергия» нормальных колебаний. Самое нижнее состояние решетки имеет энергию, равную сумме энергии  $\frac{1}{2}\hbar\omega_k$  отдельных нормальных колебаний. Это «нулевое движение» решетки экспериментально наблюдаемо в виде флуктуаций положений и импульсов ионов кристаллической решетки; его можно обнаружить экспериментально многими способами, например изучая диффракцию рентгеновских лучей или доплеровское смещение ядерного  $\gamma$ -излучения, испускаемого колеблющимися ядрами, находящимися в узлах кристаллической решетки. Энергия этого «нулевого движения», или «нулевая энергия», однако, конечна и не причиняет нам никаких неприятностей в теории твердого тела, так как имеется ограниченный набор возможных значений  $k$ . Наоборот, в квантовой теории поля (имеющего бесконечное число степеней свободы, которые тоже можно представить набором гармонических осцилляторов) мы получаем бесконечную «нулевую энергию» для низшего по энергии, или основного, состояния системы, т. е. «вакуумного состояния». Нулевую энергию можно легко исключить, про-

<sup>1)</sup> В классической теории твердого тела, т. е. в классических теориях упругости, теплопроводности, электропроводности и т. д., дискретную переменную  $x$  считают непрерывной переменной, а смещение  $q(x)$  рассматривают как функцию  $x$ . Классические уравнения движения твердого тела оказываются уравнениями в частных производных, а не системой обыкновенных дифференциальных уравнений, и поэтому с ними работать намного проще. Непрерывная переменная  $x$ , однако, не является никоим образом динамической переменной, а оказывается просто координатой, отмечающей пространственную точку, с которой связана динамическая переменная  $q(x)$ . В классической теории поля, как и в квантовой, «непрерывная» формулировка абсолютно строгая. Динамическими переменными в классической теории поля являются переменные, характеризующие классические поля, например электрическое поле  $E(x)$  или магнитное поле  $B(x)$ . Непрерывная переменная  $x$  выступает, однако, тоже как индекс, как и в теории твердого тела, а не как динамическая переменная. В квантовой теории поля все функции, являющиеся динамическими переменными, представляются операторными функциями, удовлетворяющими определенным коммутационным соотношениям. Все это может привести к недоразумению: тот, кто привык смотреть на  $x$  как на оператор, должен запомнить, что в квантовой и в классической теориях поля  $x$  — индекс, а не оператор.

сто отбрасывая ее, как в (12.16). Эту процедуру отбрасывания нулевой энергии иногда называют процедурой «записи операторов рождения и уничтожения в нормальном порядке» в произведениях этих операторов, появляющихся в гамильтонианах; в нормальном порядке операторы уничтожения должны стоять справа от операторов рождения, так что при действии на вакуумное состояние нормальное произведение операторов рождения и уничтожения дает нуль.

Хотя энергию нулевых колебаний мы отбросили в (12.16), но ведь существуют другие физические проявления этих «нулевых» движений, которые уже никак нельзя исключить из теории. Они связаны с соотношением неопределенностей, т. е. с невозможностью приготовить такое состояние квантовой системы, в котором значения двух канонически сопряженных переменных равнялись бы одновременно точно нулю. Должны существовать, таким образом, «вакуумные» флуктуации величин физических полей, например электромагнитного поля. Эти флуктуации действительно приводят к физически наблюдаемым эффектам.

Внесем теперь один электрон в наш кристалл, например в кристалл NaCl, в котором чередуются положительные и отрицательные ионы, и будем считать, что кристалл способен поляризоваться. Наш электрон, находящийся в данной точке пространства, будет поляризовать окружающую его кристаллическую решетку, притягивая к себе положительные ионы и отталкивая отрицательные ионы. Эта поляризация приведет к появлению электрического поля и электростатического потенциала по соседству с нашим электроном, причем этот потенциал будет положительным, так как положительные заряды смещаются *по направлению* к электрону, а отрицательные — от него. Электрон, помещенный в поляризуемый кристалл, создаст вокруг себя потенциальную яму. Когда этот электрон начнет двигаться по кристаллу, движению будет противодействовать взаимодействие его с кристаллической решеткой. Электрон, как легко понять, будет стремиться перенести с собой образованную вокруг него потенциальную яму. Когда, однако, инерция ионов решетки будет большой, яма не сможет поспеть за быстрым движением электрона, и тогда электрон вообще не сможет двигаться по решетке — он будет только осциллировать взад и вперед в созданной им потенциальной яме. Этот предельный режим движения называется «пределом сильной связи». Потенциал ямы при этом будет иметь в качестве центра усредненное во времени фиксированное в пространстве положение электрона. Это тот потенциал, который создается размазанным распределением заряда, получаемым при усреднении движения электрона на интервале времени, меньшем времени, характеризующего способность решетки следовать за движением электрона. Когда связь «слабая», т. е. когда потенциальная яма не доста-

точно глубокая, чтобы связать электрон, он сможет более или менее свободно двигаться по решетке, и его взаимодействие с кристаллической решеткой будет возбуждать волны, или фононы, в ней. Основным процессом при этом будет процесс рассеяния электрона с одновременным испусканием или поглощением решеточного фонона. Формально такие процессы рассеяния можно описать, как в § 15 гл. 8, добавив к гамильтониану решетки члены описывающие движение электрона и его взаимодействие с решеткой. Таким образом, если через  $r$  обозначить координату электрона, а через  $p$  — его импульс, мы будем иметь

$$H_e = \frac{p^2}{2m}, \quad (12.37a)$$

$$H_{int} = \sum_x V [r - x - q(x)], \quad (12.37b)$$

$$= \sum_x \sum_k V_k e^{-ik \cdot [r - x - q(x)]}, \quad (12.37в)$$

где  $m$  — масса электрона. Потенциал взаимодействия  $V$  зависит только от расстояния между электроном и ионом; координата последнего равна  $x + q(x)$ . Этот потенциал надо затем просуммировать по всем ионам и для удобства записать так же, как в § 15 гл. 8, т. е. перейти от потенциала к его фурье-образу [см. (12.37в)]. Это дает нам выражение для оператора взаимодействия через нормальные координаты, или фононные переменные.

Вообще говоря, смещения  $q(x)$  малы по сравнению с длинами волн фононов, и поэтому можно воспользоваться разложением

$$e^{ik \cdot q(x)} \approx 1 + ik \cdot q(x). \quad (12.38)$$

Подставляя (12.38) в гамильтониан взаимодействия (12.37в) и замечая, что  $\sum_x e^{ik \cdot x} = 0$ , получаем

$$H_{int} \approx \sum_x \sum_k V_k e^{-ik \cdot r} e^{ik \cdot x} [ik \cdot q(x)]. \quad (12.39)$$

Гамильтониан взаимодействия (12.39) легко выразить через переменные нормальных колебаний (12.33), так как

$$H_{int} \approx \sum_k iNV_k e^{-ik \cdot r} \xi_k. \quad (12.40)$$

Описывая наш электрон в формализме вторичного квантования и вводя бозонные операторы (12.36) для нормальных колебаний ионов, будем иметь

$$H_{int} \approx \sum_{kk'} NV_k \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_k}} c_k^\dagger c_{k'+k} (a_k^\dagger - a_{-k}). \quad (12.41)$$



Взаимодействие (12.41) имеет тот же вид, что и взаимодействие (12.1в), которое описывает процессы испускания и поглощения бозонов фермионами. Проблема полярона, таким образом, формально тождественна проблеме взаимодействующей системы фермионов и бозонов с гамильтонианом взаимодействия (12.31). Сейчас, однако, у нас только один фермион, т. е. это наш единственный электрон, а бозонами являются фононы. Но, конечно, те же самые методы теории возмущений, в частности технику фейнмановских диаграмм, можно применить и к проблеме полярона, хотя и имеются важные различия между этой проблемой и проблемой взаимодействующих фермионов и бозонов. Сейчас у нас нет расходимостей, так как имеется обрезание на коротких длинах волн фононов; следовательно, ренормализационные множители все конечные. Кроме того, они измеримы и экспериментально, так как вполне возможно вынуть электрон из кристалла и измерить его «голые» массу и заряд в отсутствие связи с «фононным полем» кристаллической решетки. «Ренормированная» масса полярона обычно называется его «эффе́ктивной массой».

### § 6. Предел сильной связи, классический предел и процедура «деквантования»

В стандартном подходе классические поля квантуют, чтобы получить их кванты, или частицы. В этом параграфе мы пойдем по обратному пути, т. е. будем «деквантовать» частицы, чтобы получить из них классическое поле, причем для простоты рассмотрим только случай одного измерения.

Давайте опять рассмотрим гамильтониан (12.1а) и постараемся найти возможные приближенные методы для работы с ним. Теория возмущений, описанная выше и использующая технику фейнмановских диаграмм, может быть полезной только в том случае, когда взаимодействие (12.1в) в гамильтониане (12.1а) достаточно малое и его действительно можно считать возмущением. Когда оно не малое, как в теории полярона, тогда теория возмущений ничего не дает.

Существует, однако, приближенный метод рассмотрения гамильтониана (12.1а), аналогичный методу Хартри — Фока в теории многочастичных квантовых систем. В теории полярона этот метод позволяет описать такой режим движения, когда электрон создает вокруг себя потенциальную яму, получающуюся в результате поляризации им окружающей кристаллической решетки. Так как движение электрона управляется действием потенциала, созданного в свою очередь самим электроном, то мы имеем тем самым типичную задачу на отыскание самосогласованного поля. Разумно ожидать, что получаемое таким путем приближенное решение будет правильным в пределе *сильной* связи, т. е. в пределе,

в котором взаимодействие достаточно велико, чтобы связать электрон в образованной им потенциальной яме.

Предположим, что в нашей системе бозоны и фермионы движутся как «независимые частицы», и постараемся отыскать наилучшую пробную волновую функцию, основываясь на квантовомеханическом вариационном принципе. Правда, при этом мы сразу же сталкиваемся с одной небольшой трудностью, связанной с несохранением полного числа бозонов для нашего гамильтониана (12.1в). (Ведь мы хотим посмотреть, как происходит испускание и поглощение бозонов фермионом в рамках указанного приближения.) Возьмем пробную волновую функцию нашей многочастичной квантовой системы в виде

$$|\psi\rangle = f(c^\dagger) g(a^\dagger) |0\rangle, \quad (12.42)$$

где  $f$  и  $g$  — произвольные функции, зависящие от фермионного и бозонного операторов рождения соответственно, т. е. мы не требуем, чтобы функция (12.42) была со строго фиксированным числом частиц. При работе с функцией (12.42) нам удобно рассмотреть состояния

$$|f\rangle = f(c^\dagger) |0\rangle, \quad (12.43a)$$

$$|g\rangle = g(a^\dagger) |0\rangle \quad (12.43b)$$

и нормировать функции  $f$  и  $g$  таким образом, чтобы оба состояния (12.43) были по отдельности нормированы. Состояния (12.43a) и (12.43b) — это состояния либо фермионов, либо бозонов соответственно. Для пробной волновой функции (12.42) среднее значение гамильтониана (12.31) легко выразить через средние значения для состояний (12.43), так как бозонные и фермионные операторы строго коммутируют друг с другом. Действительно, имеем

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle = & \langle f | \sum_k E_k c_k^\dagger c_k | f \rangle + \langle g | \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q | g \rangle + \\ & + \sum_{kq} G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle \langle g | a_q^\dagger | g \rangle + \\ & + \sum_{kq} G_{kq}^* \langle f | c_{k+q}^\dagger c_k | f \rangle \langle g | a_q | g \rangle. \end{aligned} \quad (12.44)$$

Используя неравенство вариационного принципа для величины, даваемой выражением (12.44), и независимо варьируя вид функций  $f$  и  $g$  для оптимизации этого неравенства, мы приходим к системе двух зацепленных уравнений, которые имеют вид уравнений Шредингера для состояний (12.43a) и (12.43b):

$$H_F |f\rangle = E_F |f\rangle, \quad (12.45a)$$

$$H_B |g\rangle = E_B |g\rangle. \quad (12.45b)$$

Здесь

$$H_F = \sum_k E_k c_k^\dagger c_k + \sum_{kq} \{G_{kq} c_k^\dagger c_{k+q} \langle g | a_q^\dagger | g \rangle + G_{kq}^* c_{k+q}^\dagger c_k \langle g | a_q | g \rangle\}, \quad (12.46a)$$

$$H_B = \sum_q \omega_q a_q^\dagger a_q + \sum_{kq} \{G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle a_q^\dagger + G_{kq}^* \langle f | c_{k+q}^\dagger c_k | f \rangle a_q\}. \quad (12.46b)$$

«Фермионный» гамильтониан  $H_F$  описывает независимое движение фермионов в одночастичном потенциале, который задается средними значениями бозонных операторов. «Бозонный» гамильтониан  $H_B$  описывает набор никак не связанных друг с другом независимых гармонических осцилляторов, на каждый из которых действует своя «вынуждающая» сила, задаваемая средними значениями фермионных операторов. Таким образом, возникшая ситуация совершенно аналогична той, с которой мы сталкиваемся при рассмотрении хартри-фоковских уравнений в случае многочастичных квантовых систем. Наши фермионы движутся независимо друг от друга в некотором среднем поле, создаваемом бозонами, а бозонные гармонические осцилляторы совершают свои движения под действием определенных средних сил, действующих на них со стороны фермионов. Указанные средние поля нужно найти, используя известную процедуру самосогласования.

Точное решение бозонного уравнения (12.45b) найти легко. Оно описывает просто систему не связанных друг с другом гармонических осцилляторов, на каждый из которых действует линейная вынуждающая сила. Гамильтониан  $H_B$  можно преобразовать к виду гамильтониана, описывающего систему независимых гармонических осцилляторов. Для этого нужно произвести преобразование, сдвигающее должным образом положения равновесия каждого осциллятора. Чтобы так сделать, введем в рассмотрение новые бозонные операторы

$$\alpha_q^\dagger = a_q^\dagger + \frac{1}{\omega_q} \sum_k G_{kq}^* \langle f | c_{k+q}^\dagger c_k | f \rangle, \quad (12.47a)$$

$$\alpha_q = a_q + \frac{1}{\omega_q} \sum_k G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle. \quad (12.47b)$$

Операторы  $\alpha_q^\dagger$  и  $\alpha_q$  удовлетворяют бозевским коммутационным соотношениям

$$[\alpha_q, \alpha_r] = [\alpha_q^\dagger, \alpha_r^\dagger] = 0, \quad (12.48a)$$

$$[\alpha_q, \alpha_r^\dagger] = \delta_{qr}. \quad (12.48b)$$

Бозонный гамильтониан  $H_B$  при преобразовании к новым бозонным операторам записывается в виде

$$H_B = \sum_q \omega_q \alpha_q^\dagger \alpha_q - \sum_q \left| \frac{1}{\omega_q} \sum_k G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle \right|^2. \quad (12.49)$$

Это в точности гамильтониан для системы не связанных друг с другом осцилляторов, к которому добавлен некоторый постоянный член.

Самая низкая по энергии собственная функция для гамильтониана (12.49) есть вакуумная функция для операторов  $\alpha$ ; она удовлетворяет следующим условиям:

$$\alpha_q |g\rangle = \left( a_q + \frac{1}{\omega_q} \sum_k G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle \right) |g\rangle = 0. \quad (12.50)$$

Среднее значение числа бозонов с импульсом  $q$  в состоянии (12.50) можно найти, используя формулы (12.50) и эрмитово-сопряженные им формулы. При этом получим

$$\langle g | n_q | g \rangle = \langle g | a_q^\dagger a_q | g \rangle = \left| \sum_k G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle \right|^2 / \omega_q^2, \quad (12.51a)$$

$$= |S(q)/\omega_q|^2, \quad (12.51b)$$

где

$$S(q) = \sum_k G_{kq} \langle f | c_k^\dagger c_{k+q} | f \rangle. \quad (12.51в)$$

Среднее значение квадрата числа бозонов с импульсом  $q$  в рассматриваемом состоянии равно

$$\langle g | n_q^2 | g \rangle = \langle g | a_q^\dagger a_q a_q^\dagger a_q | g \rangle = \langle g | a_q a_q^\dagger | g \rangle |S(q)/\omega_q|^2, \quad (12.52a)$$

$$= \langle g | n_q + 1 | g \rangle \langle g | n_q | g \rangle, \quad (12.52b)$$

так что

$$\langle g | n_q^2 | g \rangle - \langle g | n_q | g \rangle^2 = \langle g | n_q | g \rangle. \quad (12.52в)$$

Это известная из статистической физики формула для флуктуации числа частиц, в данном случае бозонов. Среднеквадратичная флуктуация равна корню квадратному из  $n$ . Таким образом, когда число бозонов с импульсом  $q$  очень велико, среднеквадратичная флуктуация этого числа оказывается сравнительно малой.

Рассмотрим теперь предельный случай, когда средние числа бозонов с импульсами  $q$  для состояния (12.50) велики, т. е. возьмем случай «больших квантовых чисел» для индивидуальных бозонных операторов, а потому перейдем к классическому пределу для них. Флуктуации в числах бозонов  $n_q$  малы, и, следовательно, мы можем рассматривать  $n_q$  как классические переменные [значения которых даются средними значениями, вычисленными по фор-

мулам (12.51)]. Мы можем также рассматривать операторные переменные  $a_q$  и  $a_q^\dagger$  как классические в этом предельном случае. Как видим, фермионный гамильтониан  $H_F$  описывает движение независимых фермионов в некотором классическом поле. Давайте теперь вторично «деквантуем» гамильтониан  $H_F$  и запишем его в виде гамильтониана системы фермионов в шредингеровском формализме. Первое слагаемое в нем представляет полную кинетическую энергию фермионов. Второе содержит «импульсные сдвигные» операторы  $c_{k+q}^\dagger c_k$ , которые надо заменить на экспоненты  $e^{iq \cdot r}$  в шредингеровском формализме. Таким образом, имеем

$$H_F = \sum_i \{ T_i + \sum_q G(p_i, q) e^{-iq \cdot r_i} a_q^\dagger + \sum_q e^{iq \cdot r_i} G^*(p_i, q) a_q \}, \quad (12.53)$$

причем зависимость коэффициентов  $G_{kq}$  от волнового числа  $k$  привела здесь к зависимости величины  $G(p_i, q)$  от оператора импульса  $p_i$ . Если мы сделаем теперь дополнительное предположение о локальности взаимодействия, т. е. о независимости его от скоростей, то должны будем считать, что величина  $G(p, q)$  не зависит также и от  $p_i$ . Условие локальности обычно предполагается выполненным в квантовой теории поля, поэтому наше допущение о том, что оно имеет место в случае теории полярона, вполне естественно.

Отметим теперь, что классические переменные  $a_q^\dagger$  и  $a_q$  задают потенциал, в котором движутся наши фермионы. Если мы запишем этот потенциал в виде некоторой функции  $V(r_i)$  в конфигурационном пространстве, то увидим, что классические переменные  $a_q^\dagger$  и  $a_q$  оказываются пропорциональными фурье-компонентам этого потенциала. Уравнения (12.45а) и (12.45б), таким образом, соответственно представляют уравнение движения системы частиц в некотором классическом внешнем поле и классическое уравнение для определения этого поля.

Рассмотренный классический предел очень легко проиллюстрировать на примере полярона. Для него классический предел соответствует такому режиму движения, когда поляризация решетки, производимая электроном, настолько велика, что квантовыми флуктуациями можно полностью пренебречь. Это означает, что смещения  $q(x)$  ионов, находящихся по соседству с данным электроном, настолько велики, что флуктуации в  $q(x)$ , наличие которых требуется квантовомеханическими соотношениями неопределенностей, оказывают пренебрежимо малое влияние на потенциал, ощущаемый нашим электроном. Следует особо подчеркнуть, что это классический предел только в отношении полевых, или фононных, переменных, которые можно рассматривать как классическое поле. Фермионные переменные, характеризующие электрон, вокруг которого образуется полярон, не обяза-

тельно должны быть классическими; вообще говоря, фермионы ведут себя как квантовомеханические частицы, подчиняющиеся уравнению Шредингера с некоторым классическим внешним потенциалом.

Когда еще в одном (дополнительном) пределе пренебрегают и «квантовыми флуктуациями фермионного поля», то говорят, что мы имеем дело со случаем «фиксированного источника», т. е. со случаем, когда фермион имеет «бесконечно большую массу» и когда его кинетической энергией можно пренебречь. При этом координаты  $r_i$ , входящие в гамильтониан (12.53), превращаются в обычные классические переменные, потому что в гамильтониане (12.53) не входит никаких других переменных, которые бы не коммутировали с этими координатами  $r_i$ . Данное утверждение справедливо как в отношении точного гамильтониана (12.1а), так и в отношении «хартри-фоковских» гамильтонианов (12.46). Мы следовательно, не ограничиваемся рассмотрением классического предела по бозонным переменным. Можно исследовать классический предел и по фермионным переменным, причем в этом последнем случае мы должны положить в гамильтониане (12.16) все  $E_k = 0$ ; факторизация бозонных и фермионных множителей (12.42) оказывается тогда совершенно точной. Так как наш гамильтониан теперь коммутирует с операторами  $r_i$ , его собственные функции можно рассматривать как одновременные собственные функции операторов  $H$  и  $r_i$ , т. е. зависимость этих собственных функций от  $r_i$  будет описываться  $\delta$ -функциями  $\delta(r_i - R_i)$ , где  $R_i$  — некоторые фиксированные координаты. Это соответствует тому, что фермионы будут занимать *фиксированные положения* в некоторых точках  $R_i$  пространства. Фиксированные положения для фермионов возможны, так как соответствующие бесконечные неопределенности в импульсах фермионов никак не влияют на динамику фермионов в предельном случае, когда массы фермионов бесконечны. В рассматриваемом «статическом случае» бозонное уравнение можно решить точно с использованием преобразования (12.47). Тогда функция  $S(q)$  будет «функцией источника» бозонного поля, и этот источник в нашем приближении фиксирован в пространстве. Если предположить, что поле локальное, то, конечно, возникнут сингулярности в точках расположения источников, происходящие от соответствующих  $\delta$ -функций. Их можно, однако, избежать, если использовать «формфакторы» для учета конечных размеров источников.

В предельном случае, в котором как бозоны, так и фермионы описываются классическими полями, вся наша задача сводится, таким образом, к отысканию статического бозонного поля, рождаемого данными фиксированными источниками. Можно поэтому сразу утверждать, что у нас должно получиться уравнение, аналогичное уравнению Пуассона. Чтобы убедиться в этом, давайте

поищем в конфигурационном пространстве полевые переменные, аналогичные переменным  $q(x)$ , описывающим смещения ионов в кристалле. Предположим, что искомые полевые переменные связаны с бозонными операторами рождения и уничтожения в точности теми же самыми формулами [(12.36а) и (12.36б) и (12.33а) и (12.33б)], как и в случае кристалла. Однако теперь координату  $x$  будем рассматривать как непрерывную переменную и все суммы заменим на интегралы.

Свободный бозонный гамильтониан можно будет тогда преобразовать к виду

$$H_0 = \sum_s \omega_s a_s^\dagger a_s = \frac{1}{2} \sum_s (\pi_s \pi_{-s} + \omega_s^2 \xi_s \xi_{-s}), \quad (12.54a)$$

$$H_0 = \frac{1}{2} \left[ \int p^2(x) dx + \frac{1}{N^2} \int dx dx' \sum_s q(x) q(x') e^{is \cdot x} e^{-is \cdot x'} \omega_s^2 \right]. \quad (12.54b)$$

Если  $\omega_s$  — энергия бозона массы  $m$ , обладающего импульсом  $\hbar s$ , то

$$\omega_s^2 = (\hbar c s)^2 + m^2 c^4. \quad (12.55a)$$

Следовательно,

$$\sum_s \omega_s^2 e^{is \cdot x} = \sum_s \{ -(\hbar c)^2 \Delta + m^2 c^4 \} e^{is \cdot x} \quad (12.55b)$$

и, проводя интегрирование по частям, получаем

$$\int dx q(x) \omega_s^2 e^{is \cdot x} = \int dx e^{is \cdot x} \{ -(\hbar c)^2 \Delta + m^2 c^4 \} q(x). \quad (12.55b)$$

Подставляя теперь (12.55b) в (12.54b), выполняя суммирование по  $s$  и производя тривиальное интегрирование по  $x'$ , находим

$$H_0 = \frac{1}{2} \left[ \int p^2(x) dx + \int q(x) \{ -(\hbar c)^2 \Delta + m^2 c^4 \} q(x) dx \right]. \quad (12.56)$$

В статическом пределе переменные  $q(x)$  надо считать классическими. Значит, вклады от некоммутирующих с ними переменных  $p(x)$  в гамильтониане (12.56) должны быть пренебрежимо малы. Гамильтониан взаимодействия (12.1в) тоже можно выразить через переменные  $q(x)$ , причем, очевидно, он будет линейно зависеть от  $q(x)$ :

$$H_{\text{int}} = \int s(x) q(x) dx; \quad (12.57)$$

здесь  $s(x)$  — функция источника, заданная в конфигурационном пространстве и связанная с функцией  $s(q)$  преобразованием Фурье.

Таким образом, в статическом пределе имеем

$$H_{\text{стат}} = \frac{1}{2} \int q(x) [-(\hbar c)^2 \Delta + m^2 c^4] q(x) + \int s(x) q(x) dx. \quad (12.58)$$

Решение «уравнения Шредингера», соответствующее гамильтониану  $H$ , для основного состояния системы легко получить, выбирая функцию  $q(x)$  такой, чтобы она минимизировала выражение (12.58). Требуя стационарность значения (12.58) по отношению к произвольной вариации

$$q(x) \rightarrow q(x) + \delta(x), \quad (12.59)$$

сразу приходим к уравнению

$$\{-(\hbar c)^2 \Delta + m^2 c^4\} q(x) + s(x) = 0. \quad (12.60)$$

Оно имеет вид уравнения Пуассона и отличается от него только дополнительным, массовым членом  $m^2 c^4 q(x)$ .

Решение уравнения (12.60) для одного точечного источника, помещенного в начале координат [т. е. при  $s(x) = \delta(x)$ ], в трехмерном случае имеет простой вид

$$q(x) \sim \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (12.61a)$$

где

$$\mu = mc/\hbar. \quad (12.61b)$$

Таким образом, мы видим, что точечный источник бозонного поля создает в окружающем пространстве потенциал юкавского типа, который при обращении в нуль массы бозона превращается в кулоновский потенциал. Параметр  $\mu$ , характеризующий размеры поля, создаваемого источником, непосредственно связан с массой бозона. Этот размер имеет порядок величины комптоновской длины волны нашего бозона.



# ***VIII. Принципы симметрии и инвариантности в релятивистской квантовой механике в изложении для пешеходов***

## ***Введение***

В гл. 13 излагается теория уравнения Дирака; мы начинаем с подробного рассмотрения двухкомпонентного волнового уравнения для частицы со спином  $\frac{1}{2}$  в ультрарелятивистском пределе. Многие особенности уравнения Дирака сохраняются в этом простом предельном случае, например наличие у релятивистской частицы состояний с отрицательной энергией, причем дается интерпретация этих состояний с помощью «дырок» и «античастиц». Далее иллюстрируется роль спиральности релятивистской частицы и свойство разделимости состояний, обладающих противоположными спиральностями в этом пределе, а также характер поведения релятивистской частицы во внешнем электромагнитном поле и факт существования дираковского магнитного момента у такой частицы. Само уравнение Дирака появляется в нашем изложении как обобщение ультрарелятивистского волнового уравнения, причем показывается, что оно сводится к нерелятивистскому уравнению Шредингера при соответствующем предельном переходе. Далее в гл. 13 изучаются точные решения уравнения Дирака для свободной частицы и обсуждается роль квантовых чисел орбитального момента количества движения, спина и четности. В заключение показывается, что при рассеянии релятивистских частиц на не зависящем от спина потенциале в борновском приближении появляется четкая тенденция к сохранению спиральности частицы при релятивистских скоростях.

В гл. 14 изложение начинается с определения и обсуждения свойств преобразований двух типов:

1) преобразований, которые связаны с *одним и тем же* состоянием, рассматриваемым по-разному; они полезны при отыскании удобных координат для данной конкретной задачи. Примером

такого преобразования является преобразование от декартовых к полярным координатам;

2) преобразований, которые связаны с двумя *различными* физическими состояниями, рассматриваемыми в *одной и той же* системе координат; они рождают семейства, или группы состояний, имеющие родственные свойства (так называемые «мультиплеты»).

Далее в гл. 14 речь идет о так называемых преобразованиях симметрии. Они коммутируют с гамильтонианом квантовой системы и определенным образом связаны с законами сохранения. Собственные значения сохраняющихся физических величин можно использовать в качестве важных квантовых чисел. Затем в гл. 14 показывается, что для линейных операторов удобно выделять семейства, или группы операторов, которые ведут себя одинаково относительно данного преобразования симметрии (получаются так называемые «неприводимые тензорные операторы»). В гл. 14 выводятся правила отбора и соотношения между матричными элементами любого неприводимого тензорного оператора (теорема Вигнера — Экарта). Далее приводятся примеры преобразований симметрии, в частности преобразования четности и трансляций. Комбинируя преобразование четности и преобразование трансляций как два не коммутирующих друг с другом преобразования симметрии, мы строим самый элементарный пример неприводимого представления группы Ли, на котором легко можно разъяснить суть явления вырождения, приводящего к мультиплетной структуре собственных функций любого гамильтониана, инвариантного относительно некоторого множества не коммутирующих друг с другом преобразований симметрии. Наконец, в § 5 гл. 14 очень кратко обсуждаются преобразование симметрии обращения времени и «антилинейные» операторы.

Калибровочные преобразования совсем другого типа; они образуют физические переменные, которые не являются непосредственно экспериментально наблюдаемыми, например потенциалы в электродинамике. При этих преобразованиях физические переменные, которые непосредственно измеряются на эксперименте, остаются неизменными, например напряженности электрического и магнитного полей. Калибровочные преобразования связывают между собой *формально различные* описания *одной и той же* физической системы. В § 6 гл. 14 мы обсуждаем простой пример частицы, находящейся во внешнем поле, заданном векторным потенциалом; ее канонический импульс и дебройлевская длина волны не есть калибровочно инвариантные величины, т. е. эти величины никак нельзя однозначно определить, если имеется магнитное поле.

Рассмотрев в § 7 гл. 14 преобразования симметрии для спиновых переменных и переменных, относящихся к внутренним степеням свободы частицы, а также преобразования симметрии для

дираковских спиновых волновых функций, мы получаем возможность проиллюстрировать важную роль таких величин, как «внутренняя четность» и «внутренний момент количества движения». Кроме того, мы разъясняем вопрос о неоднозначности фиксирования фазы волновой функции для частицы со спином  $1/2$ , получающейся при повороте исходной волновой функции на угол  $2\pi$ , описываем далее некоторые особенности введенной в § 5 антилинейной операции обращения времени и суть «крамерсовского вырождения». В § 9 гл. 14 из рассмотрения одного парадокса, обычно никак не обсуждаемого в традиционных курсах квантовой механики, мы подробно выясняем свойства операций зарядового сопряжения в теории уравнения Дирака. Суть этого парадокса заключается в следующем. Формально операция зарядового сопряжения действует во внутреннем, спиновом пространстве, а не в конфигурационном пространстве, и преобразует волновую функцию электрона, находящегося в основном состоянии атома водорода, в другую волновую функцию, совершенно также ведущую себя в обычном, конфигурационном пространстве, т. е. описывающую некоторое *связанное* состояние. С другой стороны, преобразованная волновая функция должна быть решением уравнения Дирака, которое описывает движение *позитрона* в отталкивающем его поле *протона*, а для этого движения не может быть никаких связанных состояний. Этот парадокс разрешается следующим образом. Можно показать, что решение, получаемое в результате операции зарядового сопряжения, описывает позитрон с *отрицательной* энергией, т. е. фактически мы имеем просто другое, довольно любопытное представление основного состояния атома водорода, при котором позитрон выступает как частица, а электрон — как дырка. Указанное преобразование наглядно демонстрирует полную эквивалентность частиц и дырок; оно никак не связано непосредственно с инвариантностью уравнения относительно операции зарядового сопряжения. Зарядовую инвариантность кулоновского взаимодействия в атоме водорода можно экспериментально проверить, только превращая протон в антипротон и *одновременно* электрон в позитрон.

В гл. 15 на примере группы преобразований Лоренца рассматривается теория преобразований симметрии специального вида, а именно явно зависящих от времени. Галилеевы и лоренцевы преобразования зависят от времени линейно. Из соображений симметрии при этом сразу вытекает, что коэффициент, стоящий перед временной координатой, т. е. импульс, должен быть интегралом движения, а также непосредственно следуют соотношения, связывающие энергию, импульс и спиральность. В § 2 гл. 15 развивается теория преобразований Лоренца в  $2 + 1$ -мерном пространстве. Вводятся в рассмотрение оператор независимого от времени вращения обычной плоскости и еще два оператора двух зави-

сящих от времени преобразований Лоренца, причем все три оператора удовлетворяют обычным коммутационным соотношениям для операторов момента количества движения. Налагается требование, чтобы импульсы по двум направлениям на плоскости были интегралами движения.

Квантовые числа, появляющиеся, таким образом, в теории, развиваемой в § 2 гл. 15 для обозначения состояний, вовсе не аналогичны числам  $J$ ,  $M$ , имеющимся в теории обычного момента количества движения, потому что оператор «полного момента количества движения», по определению равный сумме квадратов трех указанных выше операторов, теперь не коммутирует ни с импульсом, ни с гамилтонианом. Необходимо, оказывается, взять некоторую «неоднородную» алгебру, являющуюся расширенной алгеброй обычного момента количества движения и отличающуюся от нее тем, что в нее включаются также и операторы вектора энергии-импульса наряду с тремя операторами «момента количества движения», т. е. теперь одновременно рассматриваются и трансляции, и вращения. Мультиплеты (т. е. неприводимые представления) этой расширенной алгебры состояются из состояний, которые переходят друг в друга при преобразованиях. Мультиплеты обозначаются квантовыми числами, являющимися собственными значениями некоторых двух новых независимых операторов, которые коммутируют со всеми операторами расширенной алгебры. Каждый мультиплет включает в себя все состояния частицы определенной массы и спина, так что новые квантовые числа просто характеризуют массу и спин частицы.

В § 2 гл. 15 мы изучаем, как выражаются друг через друга состояния мультиплетов при преобразованиях Лоренца, и показываем, что преобразование, являющееся произведением двух преобразований Лоренца по разным направлениям, оказывается преобразованием Лоренца по некоторому третьему направлению, сопровождаемому дополнительным поворотом спина (вигнеровский поворот).

В § 3 гл. 15 рассматривается полная  $3 + 1$ -мерная группа преобразований Лоренца. Сначала, однако, исследуются неприводимые представления (мультиплеты) обычной группы вращений в четырехмерном пространстве, и лишь после этого строится алгебра генераторов полной группы Лоренца (в точности так же, как строилась алгебра в  $2 + 1$ -мерном случае в § 2 гл. 15: три оператора, которые поворачивают в четвертое, временное измерение, считаются зависящими линейно от времени). Показывается, что отдельные неприводимые представления по-прежнему характеризуются массой и спином данного набора состояний, т. е. энергией и моментом количества движения частицы в ее системе покоя. Состояния данного мультиплета — это состояния со всевозможными значениями импульса для такой системы. Наконец, в § 4

гл. 15 вводится «малая группа» и показывается, как можно строить вигнеровские повороты, последовательно осуществляя преобразования Лоренца.

Дираковские спинорные обозначения для отдельных представлений группы Лоренца естественным образом возникают у нас как результат поиска такого представления, в котором локальное взаимодействие описывалось бы в конфигурационном пространстве, например как взаимодействие электрона с внешним электромагнитным полем. Для такого описания требуется построить некоторые операторные функции плотности, подобные операторным функциям плотности четыре-вектора заряда-тока. Операторная функция плотности является четыре-вектором и зависит от четыре-вектора пространственно-временных координат частицы, причем оба эти четыре-вектора преобразуются совершенно независимо друг от друга при преобразованиях Лоренца. Дираковское представление получается как такое представление преобразований Лоренца, при котором каждое преобразование Лоренца факторизуется на два независимо действующих преобразования: одно в конфигурационном пространстве, а другое в пространстве спиновой переменной. В  $2 + 1$ -мерной теории двухкомпонентные спиноры получаются, когда операторы, действующие на спиновые переменные, представляются операторами, формально выглядящими как спиновые матрицы Паули, но на самом деле они действуют в пространстве положительных и отрицательных энергетических состояний, спины которых одинаковы. Условие, что волновая функция есть собственная функция операторов массы и спина, причем спин равен  $1/2$ , приводит в точности к  $2 + 1$ -мерному аналогу уравнения Дирака. При переходе от этой модельной теории к теории полной группы Лоренца и к теории обычного уравнения Дирака мы сталкиваемся с одной дополнительной трудностью, связанной с тем, что надо учитывать операцию пространственной инверсии.

## Глава 13. ВВЕДЕНИЕ В РЕЛЯТИВИСТСКУЮ КВАНТОВУЮ МЕХАНИКУ

### *Пролог*

Обычно при изложении релятивистской квантовой механики обсуждают сначала движение не взаимодействующих друг с другом частиц, а затем проводят обобщение — включают взаимодействие между частицами. При этом рассматривать свободные частицы всегда сравнительно легко независимо от используемого способа изложения теории. Трудности появляются, как только начинают рассматривать взаимодействия частиц. Имеются два вида таких трудностей — старые и новые.

Старые трудности серьезно беспокоили тех физиков, которые первыми развивали релятивистскую квантовую механику, но теперь все эти трудности окончательно разъяснены. Сегодня каждый знает, что существуют позитроны, а электроны и позитроны рождаются и уничтожаются парами при взаимодействии электронов с электромагнитным полем. Если электрон с высокой энергией рассеивается на кулоновском потенциале, то имеется конечная вероятность образования электрон-позитронных пар, которые надо обязательно учитывать при любом описании взаимодействия релятивистского электрона со статическим внешним полем.

Таким образом, мы сталкиваемся с вполне определенной трудностью при обобщении теории одночастичного уравнения Шредингера на релятивистскую область; нужно учитывать, что одна частица может внезапно превратиться в три частицы, т. е. вместо одного электрона будем иметь электрон и электрон-позитронную пару. Плотность вероятности найти частицу и плотность тока этой вероятности нужно определять и интерпретировать по-другому, так как теперь нужно учитывать возможность рождения и уничтожения частиц. Число электронов теперь больше не является интегралом движения, но по-прежнему сохраняется электрический заряд, так что уравнение непрерывности надо писать теперь для плотностей электрического заряда и электрического тока. Эти величины эквивалентны плотности вероятности найти частицу и плотности тока этой вероятности для системы нерелятивистских электронов, но в релятивистском случае они другие. Кроме того, плотность электрического заряда больше не будет положительно определенной величиной, так как система может содержать как электроны, так и позитроны.

Когда уравнения Дирака и Клейна — Гордона впервые были написаны, позитрон не был еще открыт (его существование было теоретически предсказано Дираком) и представление об «античастицах» не было развито. «Старые трудности» были по существу трудностями описания в релятивистской теории гипотетического мира без позитронов, без античастиц и без рождения пар частиц и античастиц. Теперь, когда мы знаем, что нам не нужен такой мир, эти старые трудности нас больше не беспокоят.

Новые трудности, о которых мы уже сказали выше, появились из-за недостаточного понимания до сих пор явлений, происходящих на очень малых расстояниях, т. е. при исследовании состояний частиц с очень малой длиной волны и с очень большой энергией. Если электрон — «точечная» частица, энергия кулоновского поля вокруг него бесконечна; поле такого электрона очень быстро возрастает на малых расстояниях от электрона. Далее, электрон может испускать и поглощать фотоны; при этом вклад в его энергию, т. е. в его массу, от процессов виртуального испускания и поглощения фотонов можно рассчитать с помощью теории возмущений. В результате получается бесконечная собственная энергия электрона. Интеграл по всем возможным значениям виртуального фотонного импульса расходится из-за вклада в него очень больших импульсов (коротких длин волн). Такие «ультрафиолетовые расходимости» возникают в квантовой теории поля везде, где появляются вклады от больших импульсов.

Можно было бы сказать, что эти расходимости нефизические, так как электрон на самом деле не «точечная» частица, а имеет конечные размеры. Это обстоятельство следовало бы учесть путем использования в вычислениях каких-то формфакторов, которые должны уменьшить вклады от больших передач импульса (подобный формфактор Дебая — Валлера мы уже использовали в теории эффекта Мессбауэра). Однако совсем не просто правильно ввести обрезачие формфакторы так, чтобы они вошли в теорию непротиворечиво и релятивистски обоснованно. Кроме того, любое предположение о конечных размерах электрона должно привести к появлению в теории еще одной новой физической постоянной, имеющей размерность длины и характеризующей *размеры* электрона. Пока, однако, нет никаких экспериментальных доказательств, что электрон имеет конечные размеры. Теоретические предсказания современной квантовой электродинамики все время проверяют экспериментально со все большей и большей точностью и при самых высоких доступных в лабораториях энергиях. Пока нет никаких свидетельств о каких-либо отклонениях от точечной структуры электрона. Поэтому, если даже нам удастся проникнуть при проведении эксперимента на очень малые расстояния и обнаружить у электрона конечные размеры, то эти расстояния будут на самом деле очень малыми, соответствующими очень высо-

ким энергиям, много большим энергии покоя электрона. «Ультрафиолетовые» расходимости, конечно, исчезнут, но расходящиеся в настоящее время интегралы все равно будут очень большими по величине. Размер электрона тогда определит новую абсолютную шкалу энергий с основной единицей, на несколько порядков большей энергии покоя электрона.

В принятом нами здесь способе изложения релятивистской квантовой электродинамики мы опираемся на имеющиеся в настоящее время успехи теории возмущений в вычислении наблюдаемых физических величин, связанных с электроном и электромагнитным полем. Многие из экспериментально ненаблюдаемых характеристик даются при этом бесконечными суммами расходящихся интегралов, например, оказывается бесконечной масса, которой электрон обладал бы, если бы было выключено взаимодействие между электроном и рожденным им электромагнитным полем. Введение «обрезания», или конечных размеров электрона, делает эту ненаблюдаемую массу *конечной*, хотя и очень большой; в то же время нам неясно, почему истинное значение экспериментально наблюдаемой физической массы электрона именно такое, которое действительно наблюдается, или почему велико отношение ненаблюдаемой «голой» массы к сравнительно небольшой «физической» массе. Таким образом, пока не будет экспериментальных доказательств того, что электрон действительно имеет конечные размеры, или что имеются «нарушения квантовой электродинамики на малых расстояниях», все теории, в которых оперируют обрезанными формфакторами, т. е. считают размеры электрона конечными, будут содержать большой элемент произвола, а это, конечно, не очень приятно.

Изложение релятивистской квантовой механики мы начнем здесь не с истории вопроса, а с современного ее состояния, когда все понятно в отношении старых трудностей, но практически ничего не ясно в отношении новых. Так как процессы рождения и уничтожения частиц лучше всего описывать с помощью формализма вторичного квантования, с которым мы теперь достаточно хорошо знакомы, то будем пользоваться им без всяких стеснений, т. е. не будем тратить времени на то, чтобы предварительно развивать формальный математический аппарат квантовой теории поля.

### § 1. Введение

Нерелятивистское уравнение Шредингера, записанное в виде

$$\left( H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi = 0, \quad (13.1)$$

можно считать также и *релятивистским*. Так как оператор  $H$  представляет собой оператор энергии, то оба оператора  $H$  и  $\partial/\partial t$



можно считать временными компонентами четыре-векторов, и поэтому из них можно составлять произвольные линейные комбинации, не нарушая требований релятивистской инвариантности. Как преобразуется волновая функция  $\psi$  при преобразованиях Лоренца, нам еще предстоит найти. Однако, если предположить, что это известно, у нас будет уравнение (13.1), которое преобразуется совершенно определенным образом при преобразованиях Лоренца и не содержит никаких внутренних противоречий.

Гамильтониан для системы свободных невзаимодействующих релятивистских частиц очень легко записать в формализме вторичного квантования. Пусть  $a_k^\dagger$  — оператор рождения частицы в собственном состоянии, характеризуемом импульсом  $\hbar k$  и энергией  $\varepsilon_k$ . Тогда для этого гамильтониана имеем выражение

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k. \quad (13.2)$$

Релятивистски инвариантную теорию мы сразу построим, если используем в (13.2) релятивистское соотношение между энергией и импульсом для частицы с массой  $m$ , т. е. соотношение

$$\varepsilon_{km} = [(\hbar k)^2 c^2 + m^2 c^4]^{1/2}. \quad (13.3)$$

Собственные функции гамильтониана (13.2) описывают состояния системы, в которых имеется по несколько свободных релятивистских частиц. Как легко видеть, эти состояния преобразуются должным образом при преобразованиях Лоренца от покоящейся к движущейся системам координат. Энергия и импульс частицы, связанные соотношением (13.3), преобразуются правильно при преобразованиях Лоренца.

Добавляя релятивистские взаимодействия к нашему гамильтониану  $H$ , мы не сталкиваемся с какими-либо трудностями. Всякое двухчастичное взаимодействие обычно представляется выражением

$$V = \sum_{k_1} \sum_{k_2} \sum_{k_3} \sum_{k_4} V(k_1, k_2, k_3, k_4) a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_3} a_{k_4}. \quad (13.4)$$

Это взаимодействие можно сделать релятивистски инвариантным, если потребовать, чтобы функция  $V(k_1, k_2, k_3, k_4)$  имела такую зависимость от своих аргументов, при которой она должным образом вела бы себя при преобразованиях Лоренца.

Учсть в нашем гамильтониане наличие нескольких сортов частиц и взаимодействия, приводящие к испусканию и поглощению частиц, также нетрудно. Включение в него спиновых переменных, однако, требует внимания, так как предварительно нужно выяснить, как спин преобразуется при преобразованиях Лоренца. Если это нам известно, то гамильтониан взаимодействия релятивистских частиц, обладающих спинами, очень легко написать с учетом долж-

ных ограничений на числовые функции, характеризующие взаимодействие, чтобы мы получили действительно релятивистски инвариантное взаимодействие и чтобы оно удовлетворяло всем известным законам сохранения и принципам инвариантности.

До сих пор (пока все функции рассматривались в *импульсном* пространстве) все было просто. Однако, как только мы начинаем требовать, чтобы волновые функции имели простые свойства в *конфигурационном* пространстве, сразу же возникают трудности. Мы не можем считать удовлетворительной теорию с двухчастичным взаимодействием (13.4), когда она описывает исчезновение двух частиц, скажем, в Реховоте и внезапное появление их в Тимбукту, но ни слова не говорит о том, что произошло между этими географическими пунктами. (Не следует ошибочно думать, что здесь мы имеем дело с известным туннельным эффектом квантовой механики, когда частица может «просочиться» через потенциальный барьер; в туннельном эффекте волны вероятности непрерывно проходят через потенциальный барьер, т. е. всегда имеется конечная вероятность найти частицу внутри потенциального барьера.) Чтобы убедиться, что для взаимодействия вида (13.4) такие явления не происходят, операторы рождения в нем нужно взять не в *импульсном*, а в *конфигурационном* пространстве. Это легко, конечно, сделать, если использовать для операторов рождения и уничтожения преобразование Фурье. Тогда можно будет наложить на взаимодействие *требование локальности*, т. е., например, для взаимодействия (13.4) потребовать, чтобы каждая частица рождалась в той же самой точке обычного, конфигурационного пространства, в которой другая частица исчезла (или по крайней мере в малой окрестности этой точки пространства). Операторы рождения и уничтожения частиц в конфигурационном пространстве называют «квантовыми полевыми операторами».

Теория релятивистских квантовых полей сталкивается с рядом чисто математических трудностей, и основная из них состоит в том, что никто не знает, как решить, даже приближенно, уравнение, аналогичное уравнению Шредингера (13.1), составленное для системы взаимодействующих релятивистских частиц. В теории возмущений возникают трудности с расходимостями, так как в ней имеется огромное количество промежуточных состояний с большими передаваемыми импульсами (ультрафиолетовые расходимости).

Проблема построения правильной теории одной, двух, трех и т. д. релятивистски взаимодействующих частиц в квантовой механике привела в конечном счете к созданию релятивистской квантовой теории поля и к тем трудностям, которые еще предстоит разрешить будущим исследователям. Вместе с тем в большом числе конкретных физических задач разобраться можно, используя хорошо разработанные методы, хотя, конечно, их следует считать

неудовлетворительными в определенном смысле. Много задач, как оказалось, вообще можно разрешить с помощью метода, аналогичного методу нерелятивистского уравнения Шредингера для одной частицы. Правда, отметим, что наивное обобщение нерелятивистской теории Шредингера немедленно наталкивается на трудность, которая одно время волновала выдающихся физиков, но теперь уже хорошо понята. Вместо того чтобы следовать историческому пути развития теории, мы здесь сразу объясним эту трудность и будем излагать теорию, отступив от традиций, так как связанные с указанной трудностью физические явления хорошо знакомы теперь каждому студенту, изучающему квантовую механику, и не содержат никакой тайны.

Основная трудность состоит в том, что нельзя построить последовательную замкнутую теорию релятивистской системы, имеющей строго фиксированное конечное число частиц, например одну частицу. Как хорошо известно, электрон, достаточно быстро движущийся в электростатическом поле ядра, может родить электрон-позитронную пару с соответствующей потерей им энергии. Следовательно, электрон, движущийся во внешнем электромагнитном поле, может внезапно превратиться в три частицы. Поэтому при любом описании движения релятивистского электрона во внешнем электромагнитном поле должна учитываться возможность рождения пар, если кинетическая энергия нашего электрона достаточно велика (больше энергии покоя пары). Всякая попытка описать движение заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле просто в рамках одночастичной проблемы без учета возможности образования пар неправильна в принципе и в ней обязательно возникнут противоречия.

## § 2. Релятивистская свободная частица

Попытаемся обобщить теперь шредингеровскую концепцию одночастичной волновой функции на релятивистский случай и посмотрим, какие при этом возникают трудности. Для свободной нерелятивистской частицы любое состояние можно представить линейной комбинацией состояний, являющихся плоскими волнами, т. е. положить

$$\psi(x, t) = \int d^3k g(k) e^{i[k \cdot x - \omega(k)t]}. \quad (13.5)$$

Если соотношение между частотой  $\omega$  и волновым вектором  $k$  известно при всех значениях  $k$ , волновая функция (13.5) будет определена во все моменты времени  $t$  при условии, что она нам известна в начальный момент времени  $t = 0$ . Значение волновой функции при  $t = 0$ , т. е.  $\psi(x, 0)$ , можно задать либо непосредственно, либо с помощью ее фурье-образа  $g(k)$ .

Частота и волновое число плоской волны связаны с ее энергией и импульсом следующими известными квантовыми условиями:

$$E = \hbar\omega, \quad (13.6a)$$

$$p = \hbar k. \quad (13.6b)$$

Соотношения между частотой и волновым числом получается непосредственно из условий (13.6) и нерелятивистского соотношения между энергией и импульсом частицы. Естественное релятивистское обобщение шредингеровской концепции возникает, если взять в качестве исходного релятивистское соотношение между энергией и импульсом частицы. Таким образом, имеем

$$E = p^2/2m \Rightarrow \omega = \hbar k^2/2m \text{ (нерелятивистский случай)}, \quad (13.7a)$$

$$E = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2} \Rightarrow \omega = (k^2c^2 + m^2c^4/\hbar^2)^{1/2} \text{ (релятивистский случай)}. \quad (13.7b)$$

Используя формулы (13.5)—(13.7), мы получаем очень хорошее релятивистское описание свободной частицы в релятивистской квантовой механике.

Один момент здесь, однако, требует обсуждения. Релятивистское описание должно сводиться к нерелятивистскому при малых импульсах. Разлагая (13.7b) при малых  $k$ , получаем

$$\omega \approx (mc^2/\hbar) + \hbar k^2/2m, \quad (13.8)$$

а это не совсем то, что мы имеем в нерелятивистском случае [ср. (13.7a)]: в формуле (13.8) появляется энергия покоя частицы. Различие нерелятивистской и релятивистской энергий не причиняет, однако, больших хлопот, так как абсолютное значение энергии экспериментально не наблюдаемо, и поэтому разный выбор нулевого уровня отсчета энергии не приводит ни к каким физическим эффектам. Различие формул (13.8) и (13.7a) можно также связать со сдвигом нуля отсчета на шкале частот, и тогда соотношение (13.8) представляется странным, так как каждый, кто хоть немного имел дело с радиоволнами, знает, что абсолютную величину частоты экспериментально можно измерить, что постоянный электрический ток отличается от переменного, что сдвигать произвольно нуль частоты мы не можем. *Этой трудности нет, однако, для шредингеровских волн, которые не являются электромагнитными волнами, потому что абсолютная частота их экспериментально не измерима и не имеет физического смысла.*

Экспериментально измеримые величины в квантовой механике выражаются через произведения  $\psi_i^* \psi_j$ , которые не меняются, если каждый входящий в них вектор состояния мы умножим на один и тот же периодически изменяющийся со временем фазовый множитель  $e^{i\omega t}$ .

Описание релятивистской свободной частицы с помощью формул (13.5)—(13.76) оказывается полным даже в том случае, когда мы вообще не рассматриваем никакого волнового уравнения частицы. Эти формулы позволяют найти зависимость волновой функции от времени в предположении, что значения волновой функции известны в какой-то данный начальный момент; в точности то же самое можно сказать и в отношении решения волнового уравнения Шредингера. Мы могли бы прийти к аналогичным результатам, если бы стали исходить из релятивистского уравнения Шредингера, которое легко выписать, потребовав, чтобы его решение давалось формулами (13.5)—(13.76). Соответствующее волновое уравнение оказывается просто временным уравнением Шредингера (13.1) с релятивистским гамильтонианом, задаваемым формулой

$$H = (p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}. \quad (13.9)$$

Это релятивистское волновое уравнение сводится к обычному нерелятивистскому уравнению Шредингера при малых импульсах и имеет в качестве своих решений функции (13.5) с частотами, определяемыми (13.76).

Релятивистскую теорию свободной частицы мы можем начать строить с изучения собственных состояний оператора импульса, являющихся плоскими волнами, и с исследования их временной зависимости, вместо того чтобы исходить непосредственно из волнового уравнения. Для взаимодействующих частиц временную эволюцию состояния нельзя описать столь непосредственно. В таком случае при формулировке динамической проблемы обычно используется волновое уравнение, которое нужно решать. Простейшая задача на взаимодействие — описать движение заряженной частицы во внешнем электромагнитном поле. Взаимодействие с электромагнитным полем можно учесть, заменив в волновом уравнении свободной частицы импульс  $p$  на импульс  $p - eA/c$ , где  $A$  — векторный потенциал,  $e$  — заряд частицы.

Поскольку векторный потенциал  $A$  есть функция положения электрона  $x$ , то он не коммутирует с импульсом электрона  $p$ . Подставляя  $p - eA/c$  в гамильтониан (13.9), приходим, таким образом, к уравнению, в котором под знаком квадратного корня стоит линейная комбинация не коммутирующих друг с другом операторов, т. е. к уравнению, которое можно разрешить только в очень небольшом числе специальных случаев.

### § 3. Ультрарелятивистский предел

Вместо того чтобы искать другое релятивистское волновое уравнение, заметим, что наш гамильтониан сводится к простому виду не только в нерелятивистском пределе, но также и в ультрареля-

тивистском пределе (УРП), когда  $pc \gg mc^2$ . В этом случае вместо (13.9) имеем

$$H = |pc| \quad (\text{УРП}). \quad (13.10)$$

Попробуем поэтому сначала построить удовлетворительную релятивистскую теорию одной частицы в более простом, ультрарелятивистском пределе, а не для всей области импульсов. Появление знака абсолютного значения в формуле (13.10) доставляет те же неприятности, как и наличие квадратного корня в (13.9), когда  $p$  заменяется на  $p - eA/c$ . Вместе с тем оказывается, что можно получить очень простое уравнение, практически эквивалентное (13.10), если рассмотреть частицу, обладающую спином.

Рассмотрим частицу со спином  $1/2$ , состояния которой задаются двухкомпонентными спиновыми функциями. Динамические величины, описывающие спин, это просто спиновые матрицы Паули  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  и  $\sigma_z$ . Поскольку эти матрицы ведут себя как составляющие вектора, мы можем легко построить гамильтониан, инвариантный относительно пространственных поворотов, т. е. написать

$$H' = (\sigma \cdot p) c \quad (\text{УРП}). \quad (13.11)$$

Собственные функции и собственные значения гамильтониана (13.11) очень легко построить. Для плоской волны, распространяющейся в направлении  $z$ , имеем  $p_z = p$ ,  $p_x = p_y = 0$  и  $\sigma \cdot p = \sigma_z |p|$ . Собственные значения  $\sigma_z$  равны  $\pm 1$  и соответствуют состояниям со спином, направленным «параллельно» или «антипараллельно» оси  $z$ . Эти состояния будем называть соответственно «правым» и «левым» и обозначать  $|R\rangle$  и  $|L\rangle$ , поскольку для них спин и импульс связаны друг с другом таким же образом, как для правого и левого винта.

Так как оба собственных значения для  $\sigma_z$  различны по знаку, собственные значения гамильтониана  $H'$  для этих двух состояний тоже имеют противоположные знаки:

$$H' |R\rangle = pc |R\rangle, \quad (13.12a)$$

$$H' |L\rangle = -pc |L\rangle. \quad (13.12b)$$

Поскольку гамильтониан  $H'$  инвариантен относительно пространственных поворотов, то это заключение должно остаться справедливым и при любом другом выборе положительного направления оси  $z$  (она всегда направлена вдоль вектора импульса). Таким образом, для любого состояния, взятого в виде плоской волны, имеются две отвечающие ему собственные функции гамильтониана  $H'$  с собственными значениями, равными  $\pm pc$ , в соответствии с правой и левой взаимными ориентациями спина и импульса.

В точности такой же результат можно получить для состояний с любыми направлениями импульса и вообще для любого состояния,

являющегося собственной функцией квадрата импульса  $p^2$ , а не обязательно самого импульса  $\mathbf{p}$ , скажем для сферической волны с точно определенным значением момента количества движения. Докажем это. Давайте возьмем обычное матричное представление для спиновых матриц Паули

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (13.13a)$$

и напишем

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \sigma_x p_x + \sigma_y p_y + \sigma_z p_z = \begin{pmatrix} p_z & p_x - i p_y \\ p_x + i p_y & -p_z \end{pmatrix}. \quad (13.13b)$$

Поскольку  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$  — матрица размерности  $2 \times 2$  с нулевым следом, оба ее собственных значения должны быть равны по абсолютной величине и противоположны по знаку. Произведение этих двух собственных значений равно детерминанту

$$\det(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = -p_z^2 - p_x^2 - p_y^2 = -p^2; \quad (13.14)$$

таким образом, собственные значения скалярного произведения  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$  равны  $\pm p$ , как и следовало ожидать. В этот результат входит модуль импульса  $p$ , а не отдельные его компоненты, так что наши результаты должны быть справедливыми не только для состояний, описываемых плоскими волнами, но вообще для любого состояния, которое является собственной функцией квадрата импульса  $p^2$ , т. е., например, для сферической волны.

Собственные функции гамильтониана  $H'$  для свободной частицы сильно вырождены, как и следовало ожидать. Действительно, собственное значение энергии зависит только от абсолютной величины импульса и не зависит от его направления. Два конкретных представления вырожденных собственных функций гамильтониана  $H'$  особенно интересны по чисто физическим причинам: они соответствуют *плоским* и *сферическим* волнам. В обоих случаях необходимо задавать по четыре квантовых числа для того, чтобы однозначно охарактеризовать состояние. Это тройки обычных квантовых чисел  $(p_x, p_y, p_z)$  или  $(p, j, m)$  для плоских и сферических волн соответственно. Кроме того, нужно ввести квантовое число, характеризующее направление спина и обозначаемое  $R$  или  $L$  в зависимости от того, параллелен или антипараллелен спин направлению импульса. Такое квантовое число называют квантовым числом «спиральности».

Для гамильтониана (13.11) момент количества движения, который мы вводим для характеристик сферических волн, должен быть *полным* моментом количества движения. Орбитальный момент количества движения брать нельзя, поскольку орбитальное движение и спин связаны операторным членом  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ , не коммутирую-

щим с операторами орбитального момента количества движения. Собственные функции гамильтониана (13.11) с определенным значением полного момента количества движения  $j$ , таким образом, будут линейными комбинациями функций с орбитальными моментами количества движения  $l = j + 1/2$  и  $l = j - 1/2$ . Направление спина также нельзя задавать независимо от направления импульса, потому что импульс и спин взаимодействуют. Собственными будут только состояния спиральности  $R$  и  $L$ .

Смешивание состояний с двумя разными орбитальными моментами количества движения, а также четкое различие «левого» и «правого» состояний указывают на то, что собственные функции гамильтониана (13.11) *не являются* состояниями с точно определенной четностью. Это и понятно, так как гамильтониан (13.11) является скалярным произведением аксиального и полярного векторов. Он поэтому псевдоскаляр, а не скаляр, т. е. изменяет знак при пространственной инверсии и не сохраняет четности. Прежде на ранних этапах развития теории это послужило бы достаточным основанием для того, чтобы такой гамильтониан  $H'$  отбросить и вообще не рассматривать. Теперь, после того как была присуждена Нобелевская премия за открытие *несохранения* четности в некоторых физических явлениях (в слабых взаимодействиях), нас уже не смущает гамильтониан, который не сохраняет четность, и мы его рассматриваем вполне серьезно.

#### § 4. Состояния с отрицательными энергиями. Дырки и античастицы

Наиболее интересным свойством гамильтониана  $H'$  является его спектр отрицательных собственных значений энергии, простирающийся до  $-\infty$ . С этими состояниями с отрицательными энергиями связана одна характерная трудность, возникающая при попытках построить релятивистскую теорию одной частицы. Состояния с отрицательными энергиями неизменно появляются у нас, причем они не имеют физического смысла и от них совсем не так просто избавиться. Взаимодействие, например с внешним электромагнитным полем, имеет ненулевые матричные элементы, связывающие состояния с положительными энергиями с состояниями с отрицательными энергиями. Релятивистская частица из состояния с положительной энергией может перейти в состояние с отрицательной энергией, а затем каскадом спускаться все ниже и ниже в состоянии с большими отрицательными энергиями, излучая при этом неограниченное количество энергии.

Один из способов избежать трудности и исключить эти нефизические процессы, оставаясь в рамках шредингеровской теории для одной частицы, заключается в следующем. Нужно предположить,



что все состояния с отрицательной энергией первоначально были заняты. Тогда переходы из состояний с положительными энергиями в состояния с отрицательными энергиями будут запрещены принципом Паули. Наличие этого «безбрежного моря» частиц, находящихся в состояниях с отрицательными энергиями, — факт экспериментально совершенно не наблюдаемый, пока эти частицы будут находиться в данных состояниях и не будут переходить в другие состояния. Однако в соответствии с принципом Паули частицы могут переходить из состояний с отрицательными энергиями в состояния с положительными энергиями. Такие переходы требуют затрат энергии, при них энергия не высвобождается в отличие от вышерассмотренных нефизических переходов, следовательно, они не приводят ни к каким абсурдным физическим результатам. Наоборот, вакантное состояние с отрицательной энергией можно рассматривать просто как «дырку» в точности так же, как мы это делали в теории нерелятивистских многочастичных систем.

Хотя физическая концепция «дырок в море ненаблюдаемых состояний с отрицательными энергиями» и была довольно таинственной, когда ее первоначально предложил Дирак, мы теперь без колебаний интерпретируем дырочные состояния в дираковской теории электрона как дырочные состояния в проблеме многих частиц: это удобный способ сокращенно описывать очень сложное явление. В обеих системах, обладающих многими степенями свободы, процессы, представляющие физический интерес, интерпретируются как процессы, в которых участвуют элементарные возбуждения системы. Называя физическое основное состояние системы «вакуумным состоянием» и изучая возбуждения небольшого числа частиц и дырок в этом состоянии, мы тем самым избегаем необходимости рассматривать сложную структуру истинного физического основного состояния; вместо этого мы исследуем самые простые возбуждения его, которые непосредственно связаны с величинами, изучаемыми экспериментально. В квантовой нерелятивистской теории многочастичных систем и в квантовой теории поля в случае релятивистских частиц требуется найти строгое оправдание «частично-дырочной концепции» и детально обследовать свойства основного состояния. В этих теориях показывается, что «вакуумные» процессы на самом деле необычайно сложны: существуют «квантовые флуктуации» вакуумного состояния и его можно «поляризовать», как если бы безбрежное «море» частиц, находящихся в состояниях с отрицательными энергиями, действительно существовало. Это море не наблюдаемо, пока оно не возмущено, но оно может проявиться во вполне наблюдаемых эффектах, если на него подействовать внешними полями.

Для интерпретации свойств простого гамильтониана (13.11) и его собственных функций (13.12) воспользуемся теперь «теорией

дырок». Чтобы возбудить частицу из состояния с отрицательной энергией  $-E_1$  в состояние с положительной энергией  $+E_2$ , требуется затратить энергию  $E_1 + E_2$ , причем в результате родится частица с энергией  $+E_2$  и дырка с положительной энергией  $+E_1$ , как это непосредственно очевидно. Если состояние с отрицательной энергией имеет импульс  $\mathbf{p}_1$ , а состояние с положительной энергией — импульс  $\mathbf{p}_2$ , то импульс, который надо сообщить системе, чтобы сделать возможным переход, равен  $\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1$ , т. е. импульс дырки должен быть равен  $-\mathbf{p}_1$ . Аналогично обстоит дело с моментом количества движения. Таким образом, энергия, импульс и момент количества движения дырки равны по величине и *противоположны* по знаку значениям этих величин для соответствующего состояния с отрицательной энергией. Отметим, что *одновременное* изменение знаков импульса и момента количества движения не изменяет *спиральности* частицы. Таким образом, *частицы*, описываемые гамильтонианом (13.11), все «правые», *дырки* — все «левые».

Пусть теперь рассматриваемые частицы несут электрические заряды величиной  $e$  и находятся в поле с некоторым постоянным скалярным потенциалом  $\phi$ . Гамильтониан тогда немного изменится и примет следующий вид:

$$H' = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) c + e\phi \quad (\text{УРП}). \quad (13.15)$$

Энергия  $E_{pR}$  «правых» частичных состояний и энергии  $E_{hL}$  «левых» дырочных состояний будут соответственно равны

$$E_{pR} = pc + e\phi, \quad (13.16a)$$

$$E_{hL} = -E_{pL} = -(-pc + e\phi) = pc - e\phi. \quad (13.16b)$$

Вследствие (13.16a) энергия частичного состояния сдвигается на величину, равную энергии частицы с зарядом  $e$ , в поле с потенциалом  $\phi$ . Из (13.16b) видим, что энергия дырочного состояния тоже сдвигается в точности на ту же самую величину, но с *обратным* знаком. Дырка ведет себя как частица, обладающая зарядом *обратного знака*. Действительно, поскольку электрический заряд всегда сохраняется, он должен также сохраняться и при рождении электронно-дырочной пары.

Здесь мы сталкиваемся еще с одной интересной особенностью релятивистской теории электрически заряженной частицы. Частицы должны всегда рождаться парами с равными и противоположными электрическими зарядами, чтобы полный электрический заряд сохранился. Два состояния, образующие пару, в нашем описании называются «частицами» и «дырками», а в релятивистской теории — «частицами» и «античастицами». Эти два состояния абсо-

лютно никак нельзя различить физически, т. е. совершенно неважно, какое из них называть «частицей», а какое — «античастицей». Частичное и античастичное состояния имеют равные и противоположные собственные значения всех сохраняющихся величин.

### § 5. Электрический заряд и спиральность

Выше мы обнаружили очень интересную особенность собственных функций гамильтониана  $H'$  [см. (13.15)] в случае электрически заряженных частиц. Левые и правые состояния имеют *противоположные* электрические заряды. В зависимости от того, выберем ли мы знак  $e$  положительным или отрицательным, получим теорию, которая будет описывать либо левые позитроны и правые электроны, либо, наоборот, правые позитроны и левые электроны, но не все эти четыре состояния вместе взяты. Можно добавить возмущения, или взаимодействия, в гамильтониан (13.15), которые будут вызывать переходы между различными состояниями свободной частицы, а также изменять вид собственных функций, например превращать их в водородоподобные функции. Но эти взаимодействия никогда не смогут изменить *спиральности* частицы. Конечно, мы можем рассмотреть такое взаимодействие, которое имеет ненулевые матричные элементы для переходов между состояниями с противоположной спиральностью, но переходы, описываемые такими матричными элементами, будут обязательно переходами между частичными и дырочными состояниями, т. е. переходами, соответствующими физическим процессам рождения и уничтожения частично-дырочных пар. Никаких переходов между состояниями частицы с противоположными спиральностями в этой теории быть не может.

Мы можем также рассмотреть другой гамильтониан, отличающийся от гамильтониана (13.11) знаком:

$$H'' = -(\sigma \cdot p)c \quad (\text{УРП}). \quad (13.17)$$

Этот гамильтониан имеет «левыми» частичные состояния и «правыми» дырочные состояния. Можно было бы думать, что для описания электронов в ультрарелятивистском пределе необходимы оба гамильтониана (13.11) и (13.17): один описывал бы правые позитроны и левые электроны, а другой, наоборот, — левые позитроны и правые электроны. Однако эти пары состояний никак не связаны друг с другом. Операторы взаимодействия, действующие на пространственные и спиновые переменные, могут рождать или уничтожать электрон-позитронные пары частиц с противоположными спиральностями, но они не могут изменить спиральность состояния частицы, а также родить или уничтожить электрон-позитронную пару частиц, обладающих одинаковыми спиральностями.

Вернемся к теории одной частицы в нерелятивистском пределе. Можно легко обнаружить, что и в ней имеется подобное разделение состояний на пары состояний, однако при этом речь идет о других парах. При нерелятивистском описании электронов с помощью двухкомпонентных спиновых волновых функций Паули разрешается спиральность частицы менять на обратную, но зато состояния с обоими зарядами совершенно никак не связаны друг с другом. В нерелятивистской теории используются два различных гамильтониана для описания частиц с положительными и отрицательными зарядами, и вполне может случиться, что у нас есть только электроны, а позитронов вообще нет, или наоборот. Рождение электрон-позитронных пар невозможно при нерелятивистских энергиях, а переходов частиц с изменением знака заряда экспериментально не обнаружено.

Можно было бы ожидать, что полная теория частиц со спином  $1/2$ , пригодная в нерелятивистском и ультрарелятивистском пределах, должна обязательно использовать четырехкомпонентные волновые функции, которые в обоих предельных случаях будут разделяться на пары несвязанных друг с другом двухкомпонентных спиновых волновых функций. Так обычно и строят теорию, но это делать вовсе не обязательно. В обоих предельных случаях, как указано выше, причины разделения на пары состояний совершенно различны. Разделение состояний с разными электрическими зарядами в нерелятивистском пределе кажется нам вполне разумным только потому, что мы очень привыкли к этому нерелятивистскому случаю. Странное разделение в ультрарелятивистском пределе состояний правых электронов и левых позитронов от состояний левых электронов и правых позитронов кажется нам удивительным. Вместе с тем это второе разделение более фундаментально, чем нерелятивистское разделение частиц с противоположными электрическими зарядами.

Нерелятивистскую частицу всегда можно сделать ультрарелятивистской, перейдя к другой лоренцевой системе отсчета. Поэтому разделение состояний на состояния с противоположными зарядами является приближенным, пригодным только для специальных лоренцевых систем отсчета; оно не может быть справедливым вообще. То же можно сказать и о разделении состояний в ультрарелятивистском пределе. Ультрарелятивистскую частицу можно сделать нерелятивистской, переходя к другой лоренцевой системе отсчета, мало отличающейся от системы, в которой частица покоится. В системе покоя спиральность частицы не определена. Спиральность состояния в любой системе отсчета можно изменить на обратную, перейдя к другой лоренцевой системе отсчета, в которой скорость настолько велика, что импульс частицы может изменить знак на обратный. И все же есть один случай, когда этого сделать нельзя. Частица может иметь нулевую массу покоя,

и тогда она будет всегда ультрарелятивистской и для нее вообще не будет существовать системы покоя. Для такой частицы ультрарелятивистское приближение оказывается абсолютно точным.

Нейтрино как раз является частицей с нулевой массой, и для нейтрино разделение состояний с разными спиральностями — теперь хорошо установленный экспериментальный факт. Действительно, для нейтрино справедлив либо гамильтониан (13.11), либо (13.17) (какой именно, это зависит от установленного соглашения о знаках). Нейтрино не имеют электрических зарядов, но они имеют другой «заряд» — внутреннее квантовое число, называемое «лептонным числом». Частицы и соответствующие им античастицы имеют противоположные лептонные числа. Оказывается, что нейтрино, имеющие такое же лептонное число, как электрон, всегда *левое*, а нейтрино, имеющее такое же лептонное число, как позитрон, всегда *правое*.

### § 6. Движение в магнитном поле. Магнитный момент частицы

Рассмотрим в ультрарелятивистском пределе движение в электромагнитном поле электрически заряженной частицы, обладающей спином. На частицу будут действовать силы, стремящиеся изменить направление ее импульса. Если частица обладает магнитным моментом, то на нее будут действовать также и силы, стремящиеся изменить направление ее спина. Эти силы могут изменить спиральность нашей частицы, если только они повернут по-разному спин и импульс. Это может случиться в ультрарелятивистском пределе, если только заряд и магнитный момент частицы будут связаны  $g$ -фактором, который в точности равен 2. Согласно принципу соответствия, должны были бы существовать случаи релятивистского движения частицы, которые можно описать, введя в рассмотрение классические релятивистские траектории; например, это случай движения электронов в синхротроне при высоких энергиях. Если бы разделение состояний с противоположными спиральностями для ультрарелятивистских частиц, описываемых гамильтонианом (13.11), согласовывалось с принципом соответствия, то заряженные частицы со спином  $1/2$  должны были бы иметь такой магнитный момент, значение которого дается  $g$ -фактором, равным 2. Ниже мы увидим, что именно *так и обстоит* дело для частиц, описываемых гамильтонианом (13.17).

Рассмотрим теперь свойства гамильтониана

$$H' = \sigma \cdot (pc - eA). \quad (13.18)$$

Гамильтониан (13.18) получен из гамильтониана (13.11) в результате учета в последнем обычным способом внешнего магнитного поля, описываемого векторным потенциалом  $A$ . Векторный потен-

циал  $A$  является функцией положения частицы и поэтому не коммутирует с оператором  $p$ , а также с оператором  $(\sigma \cdot p)$ . Отсюда можно было бы прийти к поспешному и неверному заключению, что спиральность не является интегралом движения при наличии магнитного поля, так как оператор  $(\sigma \cdot p)$  не коммутирует с гамильтонианом. Оператор  $p$  при наличии векторного потенциала уже больше не является кинематическим импульсом  $mv$  частицы. Спиральность будет теперь пропорциональна не оператору  $(\sigma \cdot p)$ , а оператору  $\sigma \cdot (p - eA/c)$ , а потому все равно будет сохраняться.

Свойства собственных функций гамильтониана (13.18) легко исследовать, если преобразовать к простому виду уравнение на собственные значения

$$\{\sigma \cdot (pc - eA) - E\} \psi = 0. \quad (13.19a)$$

Действуя на обе стороны этого уравнения оператором  $\sigma \cdot (pc - eA) + E$ , получаем уравнение

$$\{[\sigma \cdot (pc - eA)]^2 - E^2\} \psi = 0, \quad (13.19b)$$

которое можно упростить дальше, если воспользоваться коммутационными соотношениями; в результате имеем

$$\{(pc - eA)^2 - e\hbar\sigma \cdot \nabla \times A - E^2\} \psi = 0. \quad (13.19в)$$

Первое слагаемое в фигурных скобках равно квадрату энергии бесспиновой релятивистской электрически заряженной частицы, движущейся в электромагнитном поле. Второе слагаемое характеризует взаимодействие между спином частицы  $\sigma$  и магнитным полем  $H = \nabla \times A$ . Предположим, что первое слагаемое в (13.19в) много больше второго (имеем дело снова с ультрарелятивистским предельным случаем), и рассмотрим так называемый кинематический импульс частицы

$$p_{\text{кин}} = pc - eA. \quad (13.20)$$

Тогда уравнение (13.19в), если пренебречь членами порядка  $1/E^2$ , можно будет записать в другом виде:

$$\left[ (p_{\text{кин}}c)^2 - \left( E + \frac{e\hbar\sigma \cdot H}{2E} \right)^2 \right] \psi \approx 0 \quad (\text{УРП}) \quad (13.21a)$$

или

$$\left[ \pm |p_{\text{кин}}c| - \frac{e\hbar\sigma \cdot H}{2E} \right] \psi \approx E\psi \quad (\text{УРП}). \quad (13.21б)$$

Энергия  $E$  частицы, таким образом, равна сумме ультрарелятивистской энергии  $p_{\text{кин}}c$  и энергии взаимодействия магнитного момента частицы

$$\mu = e\hbar\sigma/2E \quad (13.22)$$

с внешним магнитным полем. Выражение (13.22) для  $\mu$  используется при определении магнитного  $g$ -фактора для релятивистской частицы. В нерелятивистском пределе  $E \approx mc^2$  и выражение (13.22) сводится к известному нерелятивистскому выражению

$$\mu = e\hbar\sigma/2mc. \quad (13.23)$$

Поскольку  $\hbar\sigma$  равно удвоенному спиновому моменту количества движения частицы ( $s = 1/2$  и собственные значения  $\sigma_z$  равны  $\pm 1$ ), мы получаем  $g$ -фактор, в точности равный 2. Это как раз то значение  $g$ -фактора, которое необходимо для сохранения спиральности частицы, движущейся по классической траектории.

### § 7. Уравнение Дирака

Попробуем теперь обобщить гамильтонианы (13.11) и (13.17) так, чтобы обобщенный гамильтониан описывал всю область импульсов, чтобы удовлетворялось соотношение (13.76) между энергией и импульсом частицы и чтобы гамильтониан переходил в известные простые выражения в нерелятивистском и ультрарелятивистском пределах. Прежде всего заметим, что наши два гамильтониана (13.11) и (13.17), построенные в ультрарелятивистском предельном случае, можно скомбинировать в один следующий гамильтониан:

$$H_{\text{УРП}} = \rho_1 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}), \quad (13.24)$$

где  $\rho_1$  — оператор, собственные значения которого равны  $\pm 1$  и который коммутирует со всеми операторами, действующими на пространственные и спиновые координаты нашей частицы. Собственные функции гамильтониана (13.24) совпадают с собственными функциями гамильтониана (13.11) при собственном значении оператора  $\rho_1$ , равном  $+1$ , и совпадают с собственными функциями гамильтониана (13.17) при собственном значении оператора  $\rho_1$ , равном  $-1$ . Оператор  $\rho_1$  описывает, таким образом, дополнительную степень свободы нашей релятивистской частицы, имеющую два собственных значения, подобно проекции спина. Поэтому оператор  $\rho_1$  можно представить матрицей размерности  $2 \times 2$ , а его собственные векторы — двухкомпонентными спиновыми волновыми функциями. Таким образом, гильбертово пространство для гамильтониана (13.24) является прямым произведением двух пространств двухкомпонентных спиновых волновых функций: одного, в котором действует оператор  $\rho_1$ , и другого, в котором действуют спиновые матрицы Паули. По аналогии с последними можно рассмотреть в  $\rho$ -пространстве три матрицы, скажем  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ , которые удовлетворяют в точности таким же, как и матрицы Паули, ком-

мутационным и антикоммутиационным соотношениям:

$$\rho_1\rho_2 + \rho_2\rho_1 = \rho_2\rho_3 + \rho_3\rho_2 = \rho_3\rho_1 + \rho_1\rho_3 = 0; \quad (13.25a)$$

$$\rho_1\rho_2 = i\rho_3; \quad \rho_2\rho_3 = i\rho_1; \quad \rho_3\rho_1 = i\rho_2; \quad (13.25b)$$

$$\rho_1^2 = \rho_2^2 = \rho_3^2 = 1; \quad (13.25b)$$

$$[\rho_i, \sigma_k] = 0. \quad (13.25g)$$

Волновую функцию частицы теперь можно представить четырехкомпонентной волновой функцией, являющейся прямым произведением двухкомпонентных спиновых волновых функций, действующих в  $\rho$ - и  $\sigma$ -пространствах. Матрицы  $\rho$  и  $\sigma$  тогда можно рассматривать как матрицы размерности  $4 \times 4$ , удовлетворяющие соотношениям (13.25), а также стандартным соотношениям, имеющим место для  $\sigma$ -матриц Паули размерности  $2 \times 2$ .

Пока что мы совершенно формально ввели оператор  $\rho_1$ , чтобы образовать из двух двухкомпонентных гамильтонианов (13.11) и (13.17) один четырехкомпонентный гамильтониан; такая процедура никак не могла повлиять на свойство разделимости состояний с одинаковыми электрическими зарядами и с противоположными спиральностями. Хотя оператор  $\rho_1$  и был формально введен именно как оператор, он по существу являлся числом, так как никаких динамических физических величин, которые бы не коммутировали с  $\rho_1$ , мы пока что не вводили. По-видимому, самая простая возможность смешать два состояния с противоположными спиральностями состоит в том, чтобы прибавить к гамильтониану (13.24) операторное слагаемое, которое было бы пропорционально  $\rho_3$ , т. е. рассмотреть следующий гамильтониан:

$$H = \rho_1(\sigma \cdot p)c + K\rho_3, \quad (13.26)$$

где  $K$  — некоторая постоянная. В ультрарелятивистском пределе  $p \gg K$  уравнение (13.26) переходит в уравнение (13.24). Однако при небольших импульсах  $p$  матрица  $\rho_1$  не будет диагональной в базисе собственных функций гамильтониана  $H$ , так как теперь в гамильтониане имеется слагаемое, которое не коммутирует с  $\rho_1$ , и состояния с противоположными спиральностями будут смешиваться друг с другом для гамильтониана (13.26).

Собственные функции гамильтониана (13.26) можно исследовать в точности тем же способом, как и собственные функции гамильтониана (13.18), а именно можно подействовать на уравнение на собственные значения, составленное для гамильтониана (13.36), таким оператором, который позволил бы избавиться от матриц  $\rho$  и  $\sigma$  с помощью антикоммутиационных соотношений для них. Таким образом, получаем

$$[\rho_1(\sigma \cdot p)c + K\rho_3 - E]\psi = 0, \quad (13.27a)$$

$$[\rho_1(\sigma \cdot p)c + K\rho_3 + E][\rho_1(\sigma \cdot p)c + K\rho_3 - E]\psi = 0, \quad (13.27b)$$

$$[p^2c^2 + K^2 - E^2]\psi = 0. \quad (13.27b)$$



Здесь матрицы  $\rho$  и  $\sigma$  выпали из окончательной формулы (13.27в) из-за того, что при преобразованиях мы использовали антикоммутиационные соотношения. Полученная нами формула (13.27в) является в точности соотношением (13.76) между энергией и импульсом релятивистской частицы, если положить  $K = mc^2$ . В результате можно получить из (13.26) в точности то уравнение, которое было впервые предложено Дираком и которое известно под названием «уравнение Дирака».

Уравнение Дирака часто записывают с помощью операторов  $\alpha$  и  $\beta$ , определяемых соотношениями

$$\alpha = \rho_1 \sigma, \quad (13.28a)$$

$$\beta = \rho_3. \quad (13.28b)$$

Тогда дираковский гамильтониан примет вид

$$H_D = \rho_1 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) c + \rho_3 mc^2, \quad (13.29a)$$

$$H_D = (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) c + \beta mc^2; \quad (13.29b)$$

при наличии внешнего электромагнитного поля мы имеем

$$H_D = \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p}c - e\mathbf{A}) + \beta mc^2 + e\phi. \quad (13.29в)$$

Обычно в научной литературе используют немного другие матрицы, которые обладают более простыми трансформационными свойствами относительно преобразований Лоренца. К сожалению, чтобы точно определить эти  $\gamma$ -матрицы, нужно определенным образом фиксировать метрику, а в отношении последней одинаково распространены два разных соглашения. Здесь мы будем пользоваться матрицами  $\rho$  и  $\sigma$  или матрицами  $\alpha$  и  $\beta$ , определение которых совершенно однозначно. При использовании  $\gamma$ -матриц оказывается, что матрица  $\rho_3 = \beta$  есть матрица  $\gamma_0$  или  $\gamma_4$ , а матрица  $\rho_1$  есть матрица  $\gamma_5$  с точностью до знака, который зависит от принятого соглашения в отношении метрики.

## § 8. Решения уравнения Дирака

Дираковский гамильтониан (13.29) описывает частицу, которая имеет две дополнительные степени свободы, кроме обычных трех степеней свободы, характеризующих ее положение в конфигурационном пространстве. Обе эти дополнительные степени свободы описываются операторами, имеющими по два собственных значения и представляемых матрицами размерности  $2 \times 2$ . Две указанные «внутренние» степени свободы — это соответственно ориентация спина частицы и степень свободы, связанная с ее динамической переменной, которая описывается операторами  $\rho_1$  и  $\rho_3$ . Таким образом, чтобы охарактеризовать собственные волновые функции релятивистской частицы, необходимо иметь пять квантовых чисел:

три для пространственных степеней свободы и по одному для каждой из «внутренних» степеней свободы.

Для правильного выбора этих квантовых чисел нам необходимо найти такие операторы, которые коммутируют с дираковским гамильтонианом  $H_D$ . Рассмотрим гамильтониан (13.29а) при отсутствии внешнего электромагнитного поля. Оператор импульса  $\mathbf{p}$  коммутирует с гамильтонианом  $H_D$ , а оператор орбитального момента количества движения  $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ , очевидно, не коммутирует с оператором  $H_D$ , так же как не коммутирует с ним оператор спина  $\sigma$ . Оператор полного момента количества движения  $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \frac{1}{2}\sigma$  коммутирует с гамильтонианом  $H_D$  и оператором  $|\mathbf{p}|$ , но не с оператором  $\mathbf{p}$ . Оператор спиральности  $h = (\sigma \cdot \mathbf{p})/|\mathbf{p}|$  коммутирует с  $H_D$ , а также с  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{j}$ . Таким образом, имеем

$$[H_D, \mathbf{p}] = [H_D, \mathbf{j}] = [H_D, h] = [\mathbf{p}, h] = [\mathbf{j}, h] = 0; \quad (13.30a)$$

$$[H_D, \mathbf{l}] \neq 0; [H_D, \sigma] \neq 0; [\mathbf{j}, \mathbf{p}] \neq 0. \quad (13.30b)$$

Мы можем, следовательно, взять собственные числа операторов  $\mathbf{p}$  или  $\mathbf{j}$  и  $p^2$  в качестве трех пространственных квантовых чисел. Оператор спиральности коммутирует с обоими операторами  $\mathbf{j}$  и  $\mathbf{p}$ , и его можно добавить к любой тройке приведенных операторов и, таким образом, получить два набора из четырех коммутирующих друг с другом операторов, которые, кроме того, коммутируют с гамильтонианом  $H_D$ : один набор четырех операторов  $(p_x, p_y, p_z, h)$  характеризует *плоские* волны; другой набор четырех операторов  $(p, j^2, j_z, h)$  — *сферические* волны.

Оператор четности в обычном конфигурационном пространстве определяется следующим образом:

$$P\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z), \quad (13.31)$$

где  $\psi$  — любая функция. Оператор (13.31) не коммутирует с гамильтонианом  $H_D$ . Однако, как легко видеть, с гамильтонианом  $H_D$  коммутирует оператор  $\rho_3 P$ , так как оба операторных множителя в нем по отдельности антикоммутируют с первым слагаемым в  $H_D$ . Используя дираковские матрицы  $\alpha$  и  $\beta$  [см. (13.28)], имеем  $\rho_3 P = = \beta P$ . Таким образом,

$$[H, P] \neq 0, \quad (13.32a)$$

$$[H, \rho_3 P] = [H, \beta P] = 0. \quad (13.32b)$$

Оператор  $\beta P$  можно назвать оператором «релятивистской четности», или «внутренней четности», подразумевая, что операция пространственной инверсии в конфигурационном пространстве сопровождается некоторой операцией в пространстве внутренней степени свободы, связанной с переменной  $\rho_1$ . Оператор четности не коммутирует с оператором спиральности, но он, конечно, коммутирует с операторами момента количества движения. Поэтому

мы можем использовать еще один набор четырех коммутирующих операторов ( $p$ ,  $j^2$ ,  $j_z$ ,  $\beta P$ ) для того, чтобы характеризовать сферические волны.

*В качестве полной системы собственных функций гамильтониана  $H_D$  можно взять либо плоские, либо сферические волны; в последнем случае мы можем рассматривать собственные функции либо спиральности, либо релятивистской четности.*

При наложении на релятивистскую частицу внешнего электромагнитного поля многие из этих квантовых чисел перестают быть «хорошими». В задаче на определение связанных состояний во внешнем *сферически симметричном* потенциале (например, в случае атома водорода) операторы  $j^2$ ,  $j_z$  и  $\beta P$  все еще будут коммутировать с гамильтонианом, в то время как оставшиеся рассмотренные выше операторы не будут с ним коммутировать, так что собственные числа операторов  $j^2$ ,  $j_z$  и  $\beta P$  можно с успехом использовать для характеристики собственных функций этой задачи. В задаче рассеяния на *сферически симметричном* потенциале асимптотический гамильтониан будет просто гамильтонианом свободной частицы, а искомые решения полного уравнения Шредингера должны асимптотически иметь вид суммы падающей плоской и расходящейся сферической волн. Поэтому собственные функции спиральности, а не четности будут более удобны для характеристики собственных функций задачи рассеяния.

Пятую, или вторую «внутреннюю», степень свободы нашей релятивистской частицы математически описать не просто. Оба оператора  $\rho_1$  и  $\rho_3$  не коммутируют с гамильтонианом  $H_D$ , причем не существует никакой их линейной комбинации, которая коммутировала бы с  $H_D$  и выглядела бы проще, чем сам полный гамильтониан. Так как каждый из операторов  $\rho_1$  и  $\rho_3$  имеет только по два собственных значения, то любую собственную функцию гамильтониана  $H_D$  можно записать в виде линейной комбинации двух собственных функций оператора  $\rho_1$  (с собственными значениями  $\pm 1$ ) или двух собственных функций оператора  $\rho_3$ . Как только мы выберем значения трех пространственных и одного спинового квантовых чисел, мы должны будем найти только значения коэффициентов, появляющихся в разложении рассматриваемой собственной функции оператора  $H_D$  по собственным функциям оператора  $\rho_1$  или оператора  $\rho_3$ . Конечно, можно взять либо собственные значения оператора  $\rho_1$ , либо собственные значения оператора  $\rho_3$ , чтобы характеризовать собственные состояния  $H_D$ , но, разумеется, это не должно влиять на окончательные результаты. Так как оператор  $\rho_1$  коммутирует с гамильтонианом  $H_D$  в ультрарелятивистском пределе, а оператор  $\rho_3$  коммутирует с гамильтонианом  $H_D$  в нерелятивистском пределе, то при использовании собственных значений оператора  $\rho_1$  для характеристики собственных состояний  $H_D$  проще проводить вычисления в ультрарелятивистском

пределе, а при использовании собственных значений оператора  $\rho_3$  проще будет рассматривать нерелятивистский предел. Ниже мы подробно разбираем оба предельных случая.

Найдем собственные функции гамильтониана  $H_D$ , характеризуемые собственными значениями импульса  $\mathbf{p}'$  и спиральности  $h'$ . Для этого будем искать каждую такую собственную функцию в виде линейной комбинации обеих собственных функций оператора  $\rho_1$  с собственными значениями, равными  $\pm\rho'_1$ , где  $\rho'_1 = \pm 1$ :

$$|\psi\rangle = A|\mathbf{p}', h', \rho'_1\rangle + B|\mathbf{p}', h', -\rho'_1\rangle; \quad (13.33)$$

здесь  $A$  и  $B$  — некоторые постоянные коэффициенты, подлежащие определению и нормированные так, что

$$A^2 + B^2 = 1. \quad (13.34)$$

Коэффициенты  $A$  и  $B$  и собственное значение  $E$  состояния (13.33) можно определить, подставляя (13.33) в уравнение на нахождение собственных функций и собственных значений гамильтониана  $H_D$ . При этом необходимо знать, как оператор  $\rho_3$  действует на собственные функции оператора  $\rho_1$ . Поскольку оба оператора унитарны, антикоммутируют друг с другом и коммутируют со всеми переменными, действующими на пространственные и спиновые переменные, оператор  $\rho_3$  при действии на собственные функции оператора  $\rho_1$  переводит одну собственную функцию в другую, т. е. изменяет собственное значение оператора  $\rho_1$ , не изменяя при этом собственных значений других операторов, причем норма состояния, на которое действует оператор, сохраняется. Мы можем, таким образом, написать

$$\rho_3|\mathbf{p}', h', \rho'_1\rangle = |\mathbf{p}', h', -\rho'_1\rangle. \quad (13.35)$$

Здесь мы договариваемся выбрать несущественные фазовые множители собственных функций так, чтобы в (13.35) фазовый множитель равнялся 1. Вообще говоря, в (13.35) может появиться какой-угодно фазовый множитель, если мы будем выбирать по-разному фазовые множители исходных собственных волновых функций и вводить специальные фазовые множители в постоянные коэффициенты  $A$  и  $B$ . При нашем выборе [см. (13.35)] коэффициенты  $A$  и  $B$  мы считали действительными и положительными.

Подставляя (13.33) в уравнение на собственные значения для гамильтониана  $H_D$  и учитывая (13.35), находим

$$\begin{aligned} H_D|\psi\rangle &= A\rho'_1 h' p' c |\mathbf{p}', h', \rho'_1\rangle - \\ &- B\rho'_1 h' p' c |\mathbf{p}', h', -\rho'_1\rangle + \\ &+ Bmc^2 |\mathbf{p}', h', \rho'_1\rangle + Amc^2 |\mathbf{p}', h', -\rho'_1\rangle = \\ &= EA |\mathbf{p}', h', \rho'_1\rangle + EB |\mathbf{p}', h', -\rho'_1\rangle. \end{aligned}$$

(13.36)

Так как обе собственные функции оператора  $\rho_1$  линейно независимы, то мы можем приравнять в (13.36) коэффициенты, стоящие перед ними, и получить

$$A\rho_1' h' p' c + Bmc^2 = EA, \quad (13.37a)$$

$$-B\rho_1' h' p' c + Amc^2 = EB. \quad (13.37b)$$

Разрешая последние два уравнения относительно  $B/A$ , находим

$$\frac{B}{A} = \frac{E - \rho_1' h' p' c}{mc^2} = \frac{E + \rho_1' h' p' c}{mc^2}. \quad (13.38)$$

Из второго равенства в (13.38) легко определить энергию  $E$ ; при этом мы приходим к соотношению между энергией и импульсом

$$E^2 = m^2 c^4 + p'^2 c^2; \quad (13.39)$$

его мы и хотели получить. Перемножая оба равенства (13.38), находим удобное выражение для  $B^2/A^2$ , которое вместе с условием нормировки (13.34) позволяет определить значения  $A^2$  и  $B^2$ :

$$\frac{B^2}{A^2} = \frac{E - \rho_1' h' p' c}{E + \rho_1' h' p' c}, \quad (13.40a)$$

$$1 + \frac{B^2}{A^2} = \frac{1}{A^2} = \frac{2E}{E + \rho_1' h' p' c}, \quad (13.40b)$$

$$A^2 = \frac{E + \rho_1' h' p' c}{2E}, \quad B^2 = \frac{E - \rho_1' h' p' c}{2E}. \quad (13.40в)$$

Извлекая в (13.40в) квадратные корни и учитывая относительный знак коэффициентов  $A$  и  $B$  [см. (13.38)], имеем

$$A = \left( \frac{E + \rho_1' h' p' c}{2E} \right)^{1/2}, \quad B = \frac{|E|}{E} \left( \frac{E - \rho_1' h' p' c}{2E} \right)^{1/2}. \quad (13.40г)$$

Формулы (13.40), как и следует ожидать, упрощаются в ультрарелятивистском пределе, когда  $pc \rightarrow E$ ; тогда  $A \rightarrow 0$ , если  $\rho_1' h' = -1$ , и  $B \rightarrow 0$ , если  $\rho_1' h' = +1$ . В этом пределе коэффициент при одном из двух слагаемых в линейной комбинации (13.33) оказывается порядка единицы, а при втором — очень малым. Поскольку каждое из слагаемых в (13.33) является двухкомпонентной спиновой волновой функцией Паули, мы заключаем, что состояние (13.33) имеет две большие и две малые компоненты в ультрарелятивистском пределе. (Использование в научной литературе терминов «большие компоненты» и «малые компоненты» связано не с этим предельным случаем, а с нерелятивистским пределом, который мы будем еще обсуждать ниже.)

Формулы (13.40) получены нами для собственных функций, берущихся в виде плоских волн; при выводе этих формул нам не требовалось знать направление импульса, а нужен был только его модуль. Можно поэтому рассмотреть линейные комбинации

плоских волн, распространяющихся по различным направлениям и имеющих вид (13.33), с коэффициентами  $A$  и  $B$ ; они зависят только от абсолютной величины импульса. Таким образом, можно построить сферические волны, являющиеся собственными функциями спиральности. Так как коэффициенты  $A$  и  $B$  [см. (13.40г)] зависят от значения  $\hbar'$  квантового числа спиральности, то мы не получим собственных функций *релятивистской четности*; последние являются нетривиальными линейными комбинациями состояний с различными спиральностями. Это полностью согласуется с нашим прежним выводом, что состояния с противоположными спиральностями разделяются в ультрарелятивистском пределе и что собственные состояния спиральности обязательно должны быть нетривиальными линейными комбинациями собственных состояний четности.

В нерелятивистском пределе  $p = 0$ , и мы имеем  $A^2 = B^2 = = 1/2$ , т. е. оба слагаемых в (13.33) оказываются одинаковыми по величине.

Найдем теперь собственные функции гамильтониана  $H_D$ , используя собственные функции оператора  $\rho_3$ , а не  $\rho_1$ , как в (13.33). Мы можем пытаться искать собственные функции гамильтониана  $H_D$  в виде

$$|\psi\rangle = C|\mathbf{p}', h', \rho'_3\rangle + D|\mathbf{p}', h', -\rho'_3\rangle, \quad (13.41)$$

где  $C$  и  $D$  — постоянные коэффициенты, подлежащие определению. Установим, как действует оператор  $\rho_1$  на собственные функции оператора  $\rho_3$ . Имеем аналогичное (13.35) соотношение

$$\rho_1|\mathbf{p}', h', \rho'_3\rangle = |\mathbf{p}', h', -\rho'_3\rangle \quad (13.42)$$

Подставляя (13.41) в уравнение на собственные значения для гамильтониана  $H_D$ , используя (13.42) и приравнявая коэффициенты при соответствующих собственных функциях в правой и левой частях равенства, получаем формулы, аналогичные (13.36)—(13.40):

$$\begin{aligned} H_D|\psi\rangle = & Ch'p'c|\mathbf{p}', h', -\rho'_3\rangle + \\ & + Dh'p'c|\mathbf{p}', h', \rho'_3\rangle - D\rho'_3mc^2|\mathbf{p}', h', -\rho'_3\rangle + \\ & + C\rho'_3mc^2|\mathbf{p}', h', \rho'_3\rangle = DE|\mathbf{p}', h', -\rho'_3\rangle + \\ & + CE|\mathbf{p}', h', -\rho'_3\rangle, \quad (13.43) \end{aligned}$$

$$Ch'p'c - D\rho'_3mc^2 = DE, \quad (13.44a)$$

$$Dh'p'c + C\rho'_3mc^2 = CE, \quad (13.44b)$$

$$\frac{D}{C} = \frac{h'p'c}{E + \rho'_3mc^2} = \frac{E - \rho'_3mc^2}{h'p'c}, \quad (13.45)$$

$$\frac{D^2}{C^2} = \frac{E - \rho'_3mc^2}{E + \rho'_3mc^2}, \quad (13.46a)$$

$$1 + \frac{D^2}{C^2} = \frac{1}{C^2} = \frac{2E}{E + \rho'_3 mc^2}, \quad (13.46б)$$

$$C^2 = \frac{E + \rho'_3 mc^2}{2E}, \quad D^2 = \frac{E - \rho'_3 mc^2}{2E}, \quad (13.46в)$$

$$C = \left( \frac{E + \rho'_3 mc^2}{2E} \right)^{1/2}, \quad D = h' \frac{E}{|E|} \left( \frac{E - \rho'_3 mc^2}{2E} \right)^{1/2}. \quad (13.46г)$$

Формулы (13.46), как и следовало ожидать, упрощаются в нерелятивистском пределе, когда  $E = mc^2$ ; тогда  $C = 0$ , если  $\rho'_3 = -1$ , и  $D = 0$ , если  $\rho'_3 = +1$ . В этом пределе коэффициент при одной из собственных функций в (13.41) оказывается порядка единицы, а при другой — практически равным нулю. (Термины «большие компоненты» и «малые компоненты», широко распространенные в научной литературе, относятся именно к нерелятивистскому пределу.)

Формулы (13.46), очевидно, пригодны и для сферических волн, поскольку коэффициенты  $C$  и  $D$  не зависят от направления импульса  $p'$ . В противоположность коэффициентам  $A$  и  $B$  коэффициенты  $C$  и  $D$  не зависят также и от значения спиральности  $h'$ ; от нее зависит только общая фаза состояний, поэтому формулы (13.41)—(13.46) можно применить к состояниям, являющимся линейными комбинациями состояний с различными спиральностями, например к собственным функциям релятивистской четности  $\rho_3 P$ . Теперь можно легко построить собственные функции в виде сферических волн, являющихся собственными функциями четности. Действительно, имеем

$$|p', j', m', h'\rangle = C |p', j', m', h', \rho'_3\rangle + D |p', j', m', h', \rho'_3\rangle, \quad (13.47а)$$

$$|p', j', m', \rho_3 P\rangle = C |p', j', m', P', \rho'_3\rangle \pm \pm D |p', j', m', -P' - \rho'_3\rangle; \quad (13.47б)$$

здесь выбор определенного знака можно сделать после того, как будут определенным образом фиксированы фазовые множители состояний четности.

Нам удобно было состояние (13.47б) записать в виде линейной комбинации одновременных собственных функций операторов  $P$  и  $\rho_3$ , причем собственные значения этих операторов изменяют знаки при переходе от одной собственной функции к другой. Эти состояния оказываются, конечно, собственными функциями оператора  $\rho_3 P$ . Любое состояние, которое является собственной функцией полного момента количества движения  $j$  со спином  $1/2$ , есть линейная комбинация двух собственных функций орбитального момента количества движения  $l$  с собственными значениями  $j \pm 1/2$ . Поскольку обе последние функции с собственными значениями  $l$ , отличающиеся на единицу, имеют противоположные четности в конфигурационном пространстве, отдельные состояния в (13.47б)

с определенной четностью будут также являться собственными функциями орбитального момента количества движения  $l$ . Таким образом, в нерелятивистском пределе, в котором  $C$  или  $D$  обращается в нуль, состояние (13.47б) оказывается собственной функцией орбитального момента количества движения. Это согласуется с тем, что известно о свойствах нерелятивистских двухкомпонентных спиновых волновых функций; для них  $l$  — «хорошее» квантовое число. Релятивистская четность  $\beta P$ , таким образом, фактически превращается в нерелятивистскую четность  $P$  в нерелятивистском пределе. Состояния с определенной спиральностью, однако, не имеют ни определенной четности, ни определенного орбитального момента количества движения даже в нерелятивистском предельном случае.

Как и следовало ожидать коэффициенты  $C$  и  $D$  в ультрарелятивистском пределе  $E \gg mc^2$  имеют одинаковый порядок величины. Если использовать собственные функции спиральности, то отдельная линейная комбинация (13.41) как раз перейдет в состояние, которое будет собственной функцией оператора  $\rho_1$ . Если же использовать собственные функции четности, то они перейдут в суммы состояний с противоположными спиральностями. Таким образом, собственные функции спиральности имеют простой вид в ультрарелятивистском и нерелятивистском пределах и содержат две большие и две малые компоненты в соответствующих представлениях (13.33) и (13.41). Собственные функции четности имеют простой вид в нерелятивистском пределе в представлении (13.41), так как содержат две большие и две малые компоненты. В ультрарелятивистском пределе они не имеют простого вида, так как их четыре компоненты будут примерно одинаковой величины в обоих представлениях (13.33) и (13.41).

Следует специально подчеркнуть здесь очевидную симметрию подходов, использующих волновые функции (13.33) и (13.41) в обоих предельных случаях, но не нужно забывать о разнице в свойствах спиральности и четности. Так как обе функции (13.33) и (13.41) являются точными решениями уравнения Дирака, то можно использовать волновые функции любого типа в любом конкретном расчете. Однако часто в зависимости от характера задачи окончательные результаты намного проще получить с одними волновыми функциями и труднее с другими.

### § 9. Рассеяние в борновском приближении на потенциале, не зависящем от спина

Рассмотрим рассеяние частицы со спином  $1/2$  на потенциале, который не зависит от ориентации спина частицы. Поперечное сечение рассеяния частицы из начального состояния  $|i\rangle$  в конечное состояние  $|f\rangle$  в борновском приближении пропорционально квадрату



матричного элемента перехода, т. е.

$$\sigma_{i \rightarrow j} \sim |\langle j | V | i \rangle|^2. \quad (13.48)$$

В отсутствие спина и в пренебрежении релятивистскими эффектами матричный элемент перехода для процесса рассеяния из состояния плоской волны  $\mathbf{p}_i$  в состояние плоской волны  $\mathbf{p}_f$  равен

$$\langle \mathbf{p}_f | V | \mathbf{p}_i \rangle = M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f). \quad (13.49)$$

Рассмотрим это нерелятивистское рассеяние, используя двухкомпонентные спиновые волновые функции  $|\mathbf{p}_i, \sigma_i\rangle$  и  $|\mathbf{p}_f, \sigma_f\rangle$ , характеризующие импульс и ориентацию спина в начальном и конечном состояниях. Так как  $V$  не зависит от спина, а волновая функция является прямым произведением пространственной волновой функции  $|\mathbf{p}\rangle$  и спиновой  $|\sigma\rangle$ , то

$$\langle \mathbf{p}_f, \sigma_f | V | \mathbf{p}_i, \sigma_i \rangle = \langle \mathbf{p}_f | V | \mathbf{p}_i \rangle \langle \sigma_f | \sigma_i \rangle = M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) \langle \sigma_f | \sigma_i \rangle. \quad (13.50)$$

Формула (13.50) имеет очень простой физический смысл. Потенциал  $V$  не действует на спиновые переменные и рассеивает частицу так, как будто бы она была бесспиновой. Матричный элемент перехода является поэтому произведением матричного элемента для рассеяния бесспиновой частицы и множителя, характеризующего перекрытие спиновых функций. Последний равен единице, если ориентация спина в конечном состоянии та же, что и в начальном, и равен нулю, если обе эти ориентации противоположны (другими словами, не зависящий от спина потенциал не может при рассеянии «переворачивать» спин).

Формулу (13.50) можно представить также в другом виде, используя в ней состояния частиц с определенной спиральностью, а не с определенной ориентацией спина (по отношению к фиксированным осям). При угле рассеяния, равном  $\theta$ , угол между ориентациями  $\sigma_f$  и  $\sigma_i$  будет  $\theta$  или  $\pi - \theta$  в зависимости от того, будут ли начальная и конечная спиральности одинаковыми или противоположными. Таким образом, имеем

$$\langle \mathbf{p}_f, h_f | V | \mathbf{p}_i, h_i \rangle_{\text{перел}} = M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) \cos \frac{1}{2} \theta \quad \text{при } h_i = h_f, \quad (13.51a)$$

$$= M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) \sin \frac{1}{2} \theta \quad \text{при } h_i = -h_f; \quad (13.51b)$$

здесь множители  $\cos \frac{1}{2} \theta$  и  $\sin \frac{1}{2} \theta$  как раз характеризуют перекрытие  $\langle \sigma_f | \sigma_i \rangle$  между спиновыми функциями состояний, получающимися одно из другого поворотом на углы  $\theta$  и  $\pi - \theta$  соответственно.

Обобщить формулу (13.51) на релятивистский случай очень просто. Нужно только в формулу (13.48) вместо двухкомпонентных волновых функций подставить собственные функции (13.33) гамильтониана Дирака. Начальное и конечное состояния будут иметь вид

$$|\mathbf{p}_i, h_i\rangle = A_i |\mathbf{p}_i, h_i, \rho_i'\rangle + B_i |\mathbf{p}_i, h_i, -\rho_i'\rangle, \quad (13.52a)$$

$$|\mathbf{p}_f, h_f\rangle = A_f |\mathbf{p}_f, h_f, \rho_f'\rangle + B_f |\mathbf{p}_f, h_f, -\rho_f'\rangle, \quad (13.52b)$$

где коэффициенты  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $A_f$  и  $B_f$  даются формулами (13.40г). Матричный элемент перехода, берущийся от потенциала  $V$  между состояниями (13.52), вычислить нетрудно, так как  $V$  коммутирует с  $\rho_1$ . Матричные элементы между состояниями, соответствующими различным собственным значениям оператора  $\rho_1$ , равны нулю. Матричный элемент перехода поэтому равен сумме вкладов от первых и от вторых слагаемых в (13.52) без перекрестных членов. Данные вклады равны просто матричным элементам, взятым между состояниями с различной спиральностью, описываемыми двухкомпонентными спиновыми функциями; последние даются формулами (13.51a) и (13.51б). Таким образом,

$$\langle \mathbf{p}_f, h_f | V | \mathbf{p}_i, h_i \rangle_{\text{рел}} = [A_f A_i + B_f B_i] \langle \mathbf{p}_f, h_f | V | \mathbf{p}_i, h_i \rangle_{\text{нерел}}. \quad (13.53)$$

Далее из (13.40) получаем

$$A_f A_i + B_f B_i = \frac{1}{2E} \{ \sqrt{(E + h_i pc)(E + h_f pc)} + \sqrt{(E - h_i pc)(E - h_f pc)} \}, \quad (13.54a)$$

$$= \begin{cases} 1 & \text{при } h_i = h_f, \\ \frac{mc^2}{E} & \text{при } h_i = -h_f. \end{cases} \quad (13.54b)$$

Подставляя (13.54) и (13.51) в релятивистскую формулу (13.53), находим

$$\langle \mathbf{p}_f h_f | V | \mathbf{p}_i h_i \rangle_{\text{рел}} = M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) \cos \frac{1}{2} \theta \quad \text{при } h_i = h_f, \quad (13.55a)$$

$$= \frac{mc^2}{E} M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f) \sin \frac{1}{2} \theta \quad \text{при } h_i = -h_f. \quad (13.55b)$$

Как видим, релятивистская формула дает в точности такой же результат, как нерелятивистская в случае рассеяния без изменения спиральности: эффективное сечение релятивистского рас-

сеяния с изменением спиральности меньше нерелятивистского в  $E/mc^2$  раз. Множитель  $mc^2/E$  обращается в единицу в нерелятивистском пределе и становится очень малым в ультрарелятивистском пределе, как этого и следовало ожидать, так как состояния с различной спиральностью разделяются в ультрарелятивистском пределе.

Теперь мы можем спросить себя: как случилось, что потенциал, не зависящий от спина, привел к результату (13.55), который существенно зависит от спина, хотя эта зависимость и исчезает в нерелятивистском пределе [см. (13.51)]? Как могли релятивистские эффекты стать причиной появления таких сил, которые не действуют на спиновый момент и в то же время изменяют ориентацию спина частицы? Ответ на эти вопросы простой. Рассмотрим случай рассеяния реального физического электрона на некотором электростатическом поле, скажем на поле атомного ядра. Когда электрон движется с релятивистской скоростью в электрическом поле, он чувствует также на себе и некоторое магнитное поле. Поле, являющееся чисто электрическим в лабораторной системе отсчета, оказывается суперпозицией электрического и магнитного полей в системе отсчета, в которой электрон покоится. Это и есть то магнитное поле, которое на самом деле действует на электрон и поворачивает его спин.

В уравнении Дирака автоматически учтены все эффекты взаимодействия магнитного момента электрона с внешним электромагнитным полем. Поэтому в релятивистской теории Дирака, описывающей движение электрона в потенциале  $V$ , являющемся электростатическим потенциалом в лабораторной системе отсчета, автоматически включены все эффекты магнитного поля, действующего на электрон в системе отсчета, в которой электрон покоится, а также все эффекты взаимодействия этого магнитного поля с магнитным моментом электрона.

Можно спросить: что произошло бы, если потенциал  $V$  не был электростатическим, а был бы другого происхождения, например скалярным мезонным потенциалом, который не приводит ни к каким магнитным эффектам в движущейся системе координат? Ведь мы нигде в наших рассуждениях не ссылались на физическую природу нашего потенциала  $V$ . Это верно! Но, с другой стороны, ведь мы добавили потенциал  $V$  к гамильтониану, т. е. к временной компоненте четырехвектора. Поэтому мы сделали неявное предположение, что потенциал  $V$  сам является временной компонентой четырехвектора, как и скалярный потенциал электромагнитного поля. Такой потенциал автоматически должен привести к эффектам «магнитного типа» в движущейся системе координат, в которой остальные три компоненты четырехвектора равны нулю. Это релятивистский эффект, поскольку напряженность возникающего «магнитного» поля пропорциональна  $v/c$ .

Когда мы имеем релятивистский скалярный потенциал, мы должны добавить к гамильтониану операторное слагаемое  $\rho_3 V$ , а не просто слагаемое  $V$ . Таким образом, мы фактически добавляем  $V$  к члену  $mc^2$  в уравнении Дирака (он является релятивистским скаляром), а не к самому гамильтониану  $H$ , который является временной компонентой четырех-вектора.

Полное эффективное сечение (просуммированное по всем поляризациям конечных состояний) пропорционально сумме квадратов обоих матричных элементов (13.55а) и (13.55б), так что

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{рел}}(\mathbf{p}_i, h_i \rightarrow \mathbf{p}_f) &\sim \sum_{h_f} |\langle \mathbf{p}_f h_f | V | \mathbf{p}_i h_i \rangle|^2 = \\ &= |M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)|^2 \left( \cos^2 \frac{1}{2} \theta + \frac{m^2 c^4}{E^2} \sin^2 \frac{1}{2} \theta \right) = \\ &= |M(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)|^2 \left[ 1 - (v^2/c^2) \sin^2 \frac{1}{2} \theta \right]. \quad (13.56) \end{aligned}$$

Чтобы связать сечения соответствующих релятивистского и нерелятивистского процессов рассеяния, мы должны еще учесть релятивистские поправки к множителю пропорциональности, стоящему перед квадратом матричного элемента. Вспомним вывод формулы борновского приближения, основанный на формуле «золотого правила» временной теории возмущений; тогда мы получили

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v} |\langle f | V | i \rangle|^2 \rho_E. \quad (13.57)$$

При учете релятивистских поправок множитель  $\rho_E/v$  в формуле (13.57) надо заменить на множитель

$$\frac{p^2}{v} \frac{dp}{dE} = \frac{p^2 E}{vc p^2} = \frac{pE}{vc^2} = \frac{m^2}{1 - v^2/c^2}; \quad (13.58)$$

здесь знаменатель  $1 - v^2/c^2$  описывает релятивистские поправки; он обращается в единицу в нерелятивистском пределе. Внося множитель (13.58) в (13.56), получаем окончательную формулу

$$\sigma_{\text{рел}}(\mathbf{p}_i, h_i \rightarrow \mathbf{p}_f) = \sigma_{\text{нерел}}(\mathbf{p}_i \rightarrow \mathbf{p}_f) \frac{1 - (v^2/c^2) \sin^2 \frac{1}{2} \theta}{1 - v^2/c^2} \quad (13.59)$$

Формула (13.59) совершенно общая; она справедлива для любой формы потенциала  $V$ , лишь бы он был скалярной компонентой четырех-векторного потенциала и не зависел от спина. Формула (13.59) имеет место для любой спиральности падающего пучка электронов, причем от значения спиральности ничто в ней не зависит. Эту формулу можно использовать и для неполяризованного пучка, являющегося некогерентной смесью двух пучков с противоположными спиральностями.

Конкретный физически интересный пример, где можно использовать формулу (13.59), — рассеяние релятивистских электронов на кулоновском потенциале легких атомных ядер. Соответствующая нерелятивистская формула в таком случае — это знаменитая *формула Резерфорда*, так что на формулу (13.59) можно посмотреть и как на описывающую релятивистские поправки к формуле Резерфорда. Можно ожидать, что борновское приближение будет справедливым для легких ядер при  $Z/137 \ll 1$ , но станет непригодным для тяжелых ядер при  $Z/137 \approx 1$ . Поправки от последующих членов в борновском ряду не равны нулю и становятся ощутимыми только для тяжелых ядер. Формула Резерфорда, полученная в нерелятивистском борновском приближении, неправильна в релятивистской области.

## Глава 14. ИНВАРИАНТНОСТЬ, ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИММЕТРИИ И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

### § 1. Типы преобразований

Решение многих квантомеханических задач существенно упрощается, если мы используем трансформационные свойства состояний и физических величин относительно некоторых преобразований. Ниже в этой главе мы всесторонне обсудим на ряде простых примеров квантомеханическую теорию преобразований.

Простейшими преобразованиями являются «координатные», например преобразования от прямоугольных декартовых координат к сферическим, или «канонические», т. е. преобразования одних координат и импульсов системы в другие ее координаты и импульсы. Все эти преобразования можно применять к любой физической системе, и они действительно полезны, если в результате преобразования гамильтониан системы и ее уравнения движения принимают простой вид. После преобразования гамильтониан, как правило, изменяет свою форму, и волновые функции выглядят иначе. Например у линии  $x = \text{const}$  совсем иные физические свойства, чем у линии  $r = \text{const}$ . Первая линия — прямая, которая может быть траекторией движения классической частицы в отсутствие действующих на нее сил; вторая линия — окружность, которая не может быть такой траекторией. Волновая функция  $e^{ikhx}$  — плоская волна; она может быть одним из состояний свободной частицы. Волновая функция  $e^{ikr}$  (не  $e^{ikr}/r$ ) — сферическая волна частного вида, которая не может быть состоянием квантовой свободной частицы. Линию  $x = \text{const}$  и плоскую волну  $e^{ikhx}$  можно, конечно, представить в сферических координатах. Однако эти величины будут выглядеть уже по-другому, в частности потребуется использовать все три координаты  $r$ ,  $\theta$  и  $\phi$ . Различие во внешнем виде преобразованного и непреобразованного состояний системы характерно для канонического преобразования, и этим оно отличается от других, так называемых «преобразований симметрии», которые мы рассмотрим ниже. (Мы не будем обсуждать гравитационное поле и кривизну пространства, которыми занимается общая теория относительности.)

*Координатные и канонические преобразования связаны с разными способами математического описания одного и того же физического состояния или одной и той же наблюдаемой физической величины. Само состояние или сама динамическая величина никак не*

изменяются при преобразованиях; изменяются просто математические символы, с помощью которых мы описываем их.

Канонические преобразования можно всегда представлять себе как результат действия на волновые функции и операторы некоторого унитарного оператора  $e^{iS}$ , т. е. считать, что волновые функции подвергаются преобразованию:

$$\psi \rightarrow e^{iS}\psi; \quad (14.1a)$$

операторы, представляющие наблюдаемые физические величины, преобразуются следующим образом:

$$A \rightarrow e^{iS}Ae^{-iS}. \quad (14.1b)$$

Когда производится каноническое преобразование, преобразуются *и состояния, и операторы*. Поэтому, так как волновые функции и операторы изменяют при преобразовании свой вид, все матричные элементы остаются неизменными при рассматриваемых преобразованиях.

Важный специальный класс координатных и канонических преобразований составляют так называемые «преобразования симметрии», которые описывают симметрию системы. Это трансляции, повороты, операция пространственной инверсии, операция обращения времени и др. При любом таком преобразовании симметрии, явно не зависящем от времени, *форма* гамильтониана, а следовательно, и вид уравнений движения не меняются, т. е. они остаются инвариантными. В отличие, скажем, от рассмотренного выше координатного преобразования, переводящего декартовы прямоугольные координаты в сферические координаты, поворот на  $90^\circ$  вокруг оси  $z$  преобразует ось  $x$  в ось  $y$ , причем обе линии  $x = \text{const}$  и  $y = \text{const}$  являются возможными траекториями движения свободной классической частицы в отсутствие действующих на нее сил, а обе волновые функции  $e^{ikx}$  и  $e^{iky}$  представляют собой плоские волны, описывающие возможные состояния движения свободной квантовой частицы. При этом повороте не изменяются ни *форма* уравнений движения свободной частицы, ни *набор* ее возможных траекторий движения или *набор* собственных функций ее гамильтониана.

Преобразования симметрии можно интерпретировать тремя разными способами: 1) как преобразования системы координат, не изменяющие природу самой физической системы; 2) как преобразования нашей физической системы в другую физическую систему без изменения системы координат; 3) как преобразования, совершающие и то и другое. При обсуждении, например, поведения атома водорода при трансляции можно считать, что мы описываем данный атом водорода в новой координатной системе с началом, сдвинутым из Реховота в Тимбукту, при этом с самим атомом водорода ничего не происходит. Можно, конечно, также спро-

силь, а что произойдет, если наш атом водорода сам сдвинется из Реховота в Тимбукту без перенесения начала системы координат из одного пункта в другой. Наконец, можно сдвинуть *одновременно* и атом водорода, и начало системы координат из Реховота в Тимбукту.

В первом случае «трансляционная инвариантность динамики атома водорода» выражается в инвариантности гамильтониана и уравнений движения при изменении переменных в результате сдвига начала отсчета системы координат. Во втором случае трансляционная инвариантность динамики атома водорода выражается в факте существования двух атомов водорода — одного в Реховоте, другого в Тимбукту, причем *оба* атома описываются *одинаковыми* уравнениями движения. В квантовой механике преобразование трансляции можно применить к любой собственной функции гамильтониана и построить из нее другую собственную функцию гамильтониана с тем же самым собственным значением. Это позволяет найти правильную классификацию состояний и получить какие-то сведения о вырождении собственных функций гамильтониана, обусловленном этими преобразованиями. В третьем случае ничего на самом деле не меняется, и все должно быть одинаково, т. е. мы не устанавливаем теперь ни свойств симметрии системы, ни особых ее динамических свойств, а имеем просто обычное каноническое преобразование.

Указанные три варианта интерпретации преобразований симметрии можно пояснить, используя наши формулы преобразования (14.1).

А. *Изменяется физическая система без изменения системы координат.* Волновая функция изменяется согласно (14.1а). Операторы относятся к одной и той же системе координат и не изменяются. Матричные элементы операторов в этом случае преобразуются следующим образом:

$$\langle \psi' | A | \psi \rangle \rightarrow \langle e^{iS}\psi' | A | e^{iS}\psi \rangle = \langle \psi' | e^{-iS} A e^{iS} | \psi \rangle. \quad (14.2a)$$

(При вычислении матричного элемента оператор унитарного преобразования всегда перекинуть с одной компоненты скалярного произведения на другую.) Из (14.2а) мы видим, что матричные элементы действительно меняются при рассматриваемом преобразовании, если только оператор  $A$  не коммутирует с оператором преобразования  $S$ .

Б. *Физическая система не изменяется, а система координат изменяется.* С волновой функцией ничего не делается. Операторы, однако, нужно выразить в новых координатах согласно (14.1б). Матричные элементы операторов в этом случае преобразуются следующим образом:

$$\langle \psi' | A | \psi \rangle \rightarrow \langle \psi' | e^{iS} A e^{-iS} | \psi \rangle. \quad (14.2b)$$



Снова мы видим, что матричные элементы изменяются при преобразовании, если только оператор  $A$  не коммутирует с оператором преобразования  $S$ . Различие в знаках показателей экспонент в (14.2а) и (14.2б) легко понять. Если, например, наше преобразование есть поворот вокруг некоторой оси в пространстве в направлении часовой стрелки, то формула (14.2а) описывает поворот *физической системы* вокруг этой оси в направлении часовой стрелки в фиксированной системе координат. Формула (14.2б) описывает поворот *системы координат* вокруг этой оси в направлении часовой стрелки при фиксированной физической системе в пространстве, т. е. поворот *против часовой стрелки* физической системы относительно системы координат.

В. *Преобразуются как физическая система, так и система координат.* Как волновые функции, так и операторы преобразуются по формулам (14.1а) и (14.1б). В этом случае матричные элементы операторов остаются неизменными:

$$\langle \psi' | A | \psi \rangle \rightarrow \langle e^{iS}\psi' | e^{iS}Ae^{-iS} | e^{iS}\psi \rangle = \langle \psi' | A | \psi \rangle. \quad (14.2в)$$

Это просто самое обычное каноническое преобразование, такое, как, например, координатное преобразование декартовых координат в сферические координаты; оно позволяет двумя разными способами производить вычисления *одних и тех же* результатов.

Формулы (14.2а) и (14.2б) показывают, что, вообще говоря, матричные элементы физических величин изменяются. Разумно выяснить поэтому, как преобразуется сама данная конкретная наблюдаемая физическая величина при указанном преобразовании. При пространственных поворотах, например, матричные элементы некоторых операторов могут не меняться вообще или же могут преобразовываться как составляющие вектора или тензора. Если гамильтониан остается неизменным при данном преобразовании, то уравнение Шредингера тоже не изменится, и преобразование будет свидетельствовать об определенной *симметрии* системы. Оператор  $S$  будет при этом интегралом движения и будет задавать некоторый закон сохранения.

Между описанными двумя типами преобразований, т. е. каноническими преобразованиями и преобразованиями симметрии, лежат «калибровочные преобразования». Подобно координатным или каноническим преобразованиям, но в отличие от преобразований симметрии, например трансляций или поворотов, калибровочное преобразование можно интерпретировать только как *формальное* изменение в описании данного физического состояния системы. Их нельзя интерпретировать как преобразование одного физического состояния в другое. И вместе с тем, хотя при общем каноническом преобразовании, которое осуществляет просто переход от одной системы координат к другой при описании системы, и не следует ожидать проявления какой-то инвариантности, *кали-*

*бровочная инвариантность* — вещь вполне определенная, и из нее вытекают интересные следствия, как это мы увидим в § 6 настоящей главы.

Специальный класс преобразований симметрии с очень интересными свойствами составляют преобразования, которые *зависят явно от времени*, например преобразования Галилея или преобразования Лоренца. Эти «временные» преобразования можно рассматривать либо как преобразования одной системы координат в другую, движущуюся относительно первой с постоянной скоростью, либо их можно рассматривать как преобразования физической системы, заключающиеся в том, что мы сообщаем ей некоторые скорости. Формулы (14.1) и (14.2) будут справедливыми и в этом случае, но теперь оператор  $S$  будет явно зависеть от времени. Из *инвариантности* относительно данных преобразований при первом способе их рассмотрения заключаем, что «законы природы одинаковы для всех наблюдателей, движущихся относительно друг друга с постоянной скоростью». При втором способе рассмотрения, исходя из инвариантности, мы имеем возможность построить из всякого данного состояния движения системы другие возможные состояния ее движения, сообщая системе постоянную скорость. В квантовой механике, пользуясь вторым способом рассмотрения, мы строим преобразование, которое переводит состояние, являющееся собственной функцией гамильтониана, в другое состояние, тоже являющееся собственной функцией гамильтониана, но обладающее другим собственным значением; иначе говоря, мы получаем определенную информацию об устройстве спектра собственных значений нашего гамильтониана, исследуя его инвариантность относительно данных преобразований.

Сначала мы рассмотрим волновые функции и операторы одной бесспиновой частицы, а потом обобщим наши рассуждения на случаи других систем.

## § 2. Четность и пространственная инверсия

Оператор  $P$  *четности*, или *пространственной инверсии*, определяется соотношением

$$P\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z), \quad (14.3)$$

т. е. любому состоянию  $\psi$  рассматриваемой простой квантовой системы он сопоставляет другое состояние, которое получается из данного состояния обращением знаков всех декартовых координат. Оба данных состояния  $\psi(x, y, z)$  и  $\psi(-x, -y, -z)$  являются «зеркальными образами» друг друга относительно начала координат. Например, если одно состояние есть состояние движения частицы по правовинтовой спиральной траектории, то другое состояние есть состояние движения ее по левовинтовой спиральной

траектории, при этом частица должна двигаться в противоположном направлении, чтобы направление момента количества движения осталось прежним.

Оператор четности особенно важен для тех физических проблем, в которых он является интегралом движения, т. е. когда он коммутирует с гамильтонианом системы:

$$[H, P] = 0. \quad (14.4)$$

Тогда говорят, что *четность сохраняется или что гамильтониан инвариантен относительно пространственной инверсии*. Если  $\psi$  — решение уравнения Шредингера (нереального или временного), то состояние  $P\psi$  тоже будет его решением. Оператор  $P$  линейный, эрмитов и удовлетворяет соотношению

$$P^2 = 1. \quad (14.5)$$

Следовательно, он унитарный, так как его собственные значения равны  $\pm 1$ : если  $P = +1$ , то говорят, что собственное состояние *четное*, если  $P = -1$ , то говорят, что собственное состояние *нечетное*.

Любое состояние  $\psi$ , не являющееся собственной функцией оператора  $P$ , можно представить в виде суммы четного и нечетного состояний, т. е.

$$\psi_{\pm} = (1 \pm P) \psi, \quad (14.6a)$$

$$P\psi_{\pm} = \pm (1 \pm P) \psi = \pm \psi_{\pm}. \quad (14.6b)$$

Факт сохранения четности помогает отыскивать решения уравнения Шредингера, потому что мы можем искать эти решения среди одновременных собственных функций операторов  $H$  и  $P$ . Если в качестве базисных функций, в виде линейных комбинаций которых ищутся решения уравнения Шредингера, мы возьмем функции, являющиеся собственными функциями оператора  $P$ , то мы можем сократить труд по построению решения наполовину, так как гамильтониан не может переключать между собой четные и нечетные состояния. Мы можем разбить наше гильбертово пространство на две части, которые никак не связаны друг с другом нашим гамильтонианом. Пока  $[H, P] = 0$  для *полного* гамильтониана с учетом всех имеющихся возмущений, переходов между четными и нечетными состояниями не может быть, т. е. *четность будет строго сохраняться при всех переходах*.

Операторы тоже можно расклассифицировать на *четные* и *нечетные* относительно операции пространственной четности, смотря по тому, коммутируют они или антикоммутируют с оператором  $P$ . Любой оператор  $A$  можно представить в виде суммы четного

оператора  $A_+$  и нечетного оператора  $A_-$  следующим образом:

$$A = A_+ + A_-, \quad (14.7a)$$

$$A_+ = \frac{1}{2} (A + PAP), \quad (14.7b)$$

$$A_- = \frac{1}{2} (A - PAP). \quad (14.7в)$$

Четный оператор  $A_+$  и нечетный оператор  $A_-$  удовлетворяют соотношениям

$$PA_+P = A_+, \quad (14.8a)$$

$$PA_-P = -A_-. \quad (14.8б)$$

Для матричных элементов четных и нечетных операторов имеют место простые *правила отбора*: для четных операторов ненулевыми будут матричные элементы между состояниями одинаковой четности, а для нечетных операторов — матричные элементы между состояниями противоположной четности. Формально в этом можно легко убедиться, рассматривая матричные элементы операторов  $A_+$  и  $A_-$  между состояниями с четностями  $P'$  и  $P''$ . Имеем

$$\langle P' | A_+ | P'' \rangle = \langle P' | PA_+P | P'' \rangle = P'P'' \langle P' | A_+ | P'' \rangle = 0 \text{ при } P' = -P'', \quad (14.9a)$$

$$\langle P' | A_- | P'' \rangle = -\langle P' | PA_-P | P'' \rangle = -P'P'' \langle P' | A_- | P'' \rangle = 0 \text{ при } P' = P'', \quad (14.9б)$$

Все эти рассуждения легко обобщить на многочастичные системы. Существуют простые правила, позволяющие определять четность состояния составной системы по четностям состояний различных ее частей. *Четность состояния составной системы равна произведению четностей состояний ее частей.*

Преобразование (14.3) можно интерпретировать тремя разными способами, как об этом говорилось выше. Обе функции в левой и правой частях (14.3) можно считать представляющими либо *два* разных физических состояния одной и той же системы, либо *одно и то же* физическое состояние ее, но записанное в разных системах координат. В последнем случае одна система координат левая, а другая — правая. Если сразу не условиться, какой именно интерпретацией мы пользуемся, то может возникнуть путаница.

Рассмотрим, например, для нечетного оператора умножения на  $x$  для данной конкретной волновой функции  $\psi$  среднее значение

$$\langle \psi | x | \psi \rangle = \int \psi^*(x, y, z) x \psi(x, y, z) dx dy dz. \quad (14.10)$$

Предположим, что мы хотим определить, «как среднее значение (14.10) ведет себя при преобразовании четности (14.3)». Тогда возможны три способа понять эту фразу, как указывалось выше.

А. Преобразование (14.3) преобразует физическое состояние  $\psi$  в другое физическое состояние, но не изменяет оператор  $x$  [см. (14.2а)], т. е.

$$\langle \psi | x | \psi \rangle \rightarrow \langle P\psi | x | P\psi \rangle = \int \psi^* (-x, -y, -z) \times \\ \times x\psi (-x, -y, -z) dx dy dz = -\langle \psi | x | \psi \rangle. \quad (14.11а)$$

Б. Преобразование (14.3) оставляет неизменным физическое состояние, но преобразует систему координат из правой в левую. Это можно записать, не трогая волновую функцию, а преобразуя оператор [см. (14.2б)]:

$$\langle \psi | x | \psi \rangle \rightarrow \langle \psi | PxP | \psi \rangle = -\langle \psi | x | \psi \rangle. \quad (14.11б)$$

В. Преобразование (14.3) преобразует и волновую функцию, и оператор [см. (14.2в)], т. е.

$$\langle \psi | x | \psi \rangle \rightarrow \langle P\psi | PxP | P\psi \rangle = \langle \psi | PPxPP | \psi \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle. \quad (14.11в)$$

При первых двух интерпретациях преобразования мы получаем один и тот же результат, но при третьей интерпретации у нас пропадает знак минус. Легче всего понять интерпретацию А.

Мы переходим к новому физическому состоянию, не меняя системы координат и не меняя природы самой физической величины. Для этого нового состояния среднее значение величины  $x$  противоположно по знаку среднему значению этой величины для старого состояния. В интерпретации В мы имеем дело с некоторым каноническим преобразованием, которое прилагается как к состоянию, так и к оператору, а потому оно не может ничего изменить. У нас одна и та же физическая величина, вычисленная в двух разных системах координат.

Интерпретация Б, пожалуй, наиболее трудная. Одно и то же состояние описывается теперь у нас в двух разных системах координат. Но при переходе к новой системе координат *физический смысл оператора  $x$  тоже меняется*. Это координата вдоль оси  $x$ , но теперь новая ось  $x$  имеет противоположное направление по отношению к старой (имевшейся до преобразования). В результате знак среднего значения все же изменится.

Остановимся на различии, имеющемся между интерпретациями Б и В; и в той и в другой преобразуется система координат. При интерпретации В среднее значение (14.11в) мы берем от физической величины, которая оказывается одной и той же при разных выборах системы координат. Пусть, скажем, ось  $x$  первоначально была направлена на звезду Сириус. Тогда среднее (14.11в) — это среднее расстояние нашей частицы от начала координат,

отсчитанное в направлении к звезде Сириус. При этом совершенно неважно, как мы обозначим координату:  $x$  или  $-x$ , что непосредственно видно из (14.11в). При интерпретации Б наше среднее значение дает среднее расстояние частицы от начала координат, отсчитанное по направлению, которое мы называем положительным направлением оси  $x$ . Если мы изменим направление осей координат, то изменим и направление оси  $x$ , хотя, очевидно, мы все время имеем дело с одной и той же физической системой. В этом и состоит различие между (14.11б) и (14.11в).

Интерпретация А самая простая. Координатная система одна и та же, и мы имеем дело с двумя конкретными физическими состояниями. Поэтому мы рекомендуем читателю рассматривать преобразования симметрии как преобразования, производимые над физической системой и не затрагивающие операторы и систему координат (всегда, когда это возможно).

На разобранной простой ситуации ясно видны некоторые общие характерные черты преобразований, которые интерпретируются как преобразования физических состояний.

1. Если мы установили, что оператор преобразования коммутирует с гамильтонианом, то

- а) можно найти новый интеграл движения (сохраняющуюся величину);
- б) действуя этим оператором на любое решение уравнения Шредингера, мы получаем снова его решение;
- в) новый интеграл движения приводит к новому квантовому числу, которое можно использовать для классификации собственных функций гамильтониана.

2. Каждый линейный оператор можно выразить через набор стандартных операторов, просто преобразующихся при данных преобразованиях (в рассматриваемом примере — это «четные» и «нечетные» операторы; в общем случае — так называемые «неприводимые тензорные операторы»).

3. Имеются определенные зависимости между величинами матричных элементов, составленных для операторов вида (14.7); они следуют из трансформационных свойств и могут быть выражены в виде простых правил отбора, вроде правил (14.9) в рассмотренном выше примере, но могут иметь и более сложный вид (теорема Вигнера — Эккарта).

4. Существует возможность интерпретировать рассматриваемые преобразования также и как преобразования, оставляющие физическое состояние неизменным, но изменяющие систему координат.

Если такое преобразование коммутирует с гамильтонианом, то вид гамильтониана и уравнений движения не меняется при переходе к новой системе координат. Однако эта интерпретация часто приводит к путанице, и ею лучше не пользоваться.

### § 3. Преобразования трансляций и сохранение импульса

Рассмотрим оператор  $T_a$ , производящий трансляцию на конечное расстояние  $a$  в направлении оси  $x$ :

$$T_a \psi(x, y, z) = \psi(x + a, y, z). \quad (14.12)$$

Любое данное состояние физической системы это преобразование трансляции переводит в другое состояние этой же системы. Преобразование трансляций будет особенно интересным, если его оператор будет коммутировать с гамильтонианом системы, т. е.

$$[H, T_a] = 0. \quad (14.13)$$

В отличие от оператора четности квадрат оператора  $T_a$  не равен единичному оператору, а равен оператору трансляции на расстояние  $2a$ . Вообще мы имеем

$$(T_a)^n = T_{na} \quad (14.14)$$

для всех целых положительных и отрицательных  $n$ . Бесконечный набор операторов (14.14) образует группу операторов. Если оператор  $T_a$  коммутирует с гамильтонианом, то все операторы (14.14) тоже коммутируют с ним. Оператор  $T_a$  линейный и унитарный, но не эрмитов; его собственные значения даются комплексными числами, по модулю равными единице.

Когда оператор  $T_a$  коммутирует с гамильтонианом, тогда можно получать новые решения уравнения Шредингера, действуя на любое решение  $\psi$  уравнения Шредингера операторами (14.14). Можно найти одновременные собственные функции операторов  $H$  и  $T_a$ . Состояние, которое можно представить в виде

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x), \quad (14.15)$$

где  $u(x)$  — некоторая периодическая функция  $x$  с периодом  $a$ , является, очевидно, собственной функцией оператора  $T_a$  с собственным значением, равным  $e^{ika}$ . Поскольку функция  $e^{i2\pi kx/a}$  есть периодическая функция от  $x$  с периодом  $a$ , то к  $k$ , характеризующему функцию (14.15), можно всегда добавить любое целое кратное числа  $2\pi/a$  [если, разумеется, при этом соответствующим образом изменить периодическую функцию  $u(x)$ ]; величина собственного значения  $e^{ika}$ , конечно, сохраняется. Таким образом,  $k$  однозначно определено только с точностью до прибавления к нему кратного числа  $2\pi/a$ .

Рассмотрим теперь случай, когда наш гамильтониан коммутирует со всеми операторами трансляций, т. е. будем считать, что соотношение (14.13) имеет место при любых значениях  $a$ . Тогда удобно определить *бесконечно малый, или инфинитезимальный*,

оператор трансляции  $T_\varepsilon$ :

$$T_\varepsilon \psi(x) = \psi(x + \varepsilon) = \psi(x) + \varepsilon \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}, \quad (14.16a)$$

$$T_\varepsilon = 1 + \varepsilon \partial / \partial x = 1 + i\varepsilon p_x / \hbar; \quad (14.16b)$$

здесь  $p_x$  означает компоненты  $x$  оператора импульса.

Если  $T_\varepsilon$  коммутирует с гамильтонианом, то  $p_x$  тоже будет коммутировать с гамильтонианом, а следовательно, компонента  $x$  импульса будет интегралом движения, т. е. будет сохраняться. Для операторов конечных трансляций мы имеем формулу

$$T_a = e^{iap_x / \hbar}. \quad (14.17)$$

Полный набор операторов всех возможных трансляций образует непрерывную группу, или «группу Ли». Оператор импульса  $p_x$  называют «инфинитезимальным оператором» или «генератором» группы, поскольку его можно использовать для построения по формуле (14.17) любого оператора трансляции по направлению  $x$ . Из инвариантности гамильтониана при преобразованиях трансляции следует, таким образом, закон сохранения импульса.

Подобно тому как линейные операторы в отношении пространственной инверсии можно было разделить на операторы двух типов (соответственно их разному поведению при операции пространственной инверсии), эти операторы можно теперь разбить на бесконечное число групп соответственно их поведению при преобразованиях трансляции. Эти «собственные операторы» остаются инвариантными, и при преобразованиях трансляций их надо умножать только на соответствующие собственные значения:

$$T_a A_k (T_a)^{-1} = e^{iap_x / \hbar} A_k e^{-iap_x / \hbar} = e^{ik a} A_k. \quad (14.18a)$$

Произвольный оператор  $A$  можно разложить по непрерывному набору собственных операторов  $A_k$  (в случае четности мы имеем очень простое разложение); это есть разложение Фурье

$$A = \int A_k dk, \quad (14.18b)$$

где

$$\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ika} T_a A (T_a)^{-1} da = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ika} e^{ip_x a / \hbar} A e^{-ip_x a / \hbar} da. \end{aligned} \quad (14.18b)$$



Формулу (14.18а), вводящую понятие «собственного» оператора, можно переписать в виде, напоминающем вид обычного уравнения на собственные значения:

$$[p_x, A_k] = \hbar k A_k. \quad (14.18г)$$

Оператор  $A_k$  увеличивает импульс состояния, на которое он действует, на  $\hbar k$ . Простыми примерами операторов  $A_k$  являются операторы  $e^{ikx_j}$ ,  $p_i e^{ikx_j}$  или  $e^{iqx_i} e^{i(k-q)x_j}$ , где  $x_i$ ,  $x_j$ ,  $p_i$  и  $p_j$  — операторы координат и импульсов каких-то двух частиц многочастичной системы и где  $q$  — произвольное число. Для собственных операторов оператора импульса справедливы правила отбора, отражающие факт сохранения импульса (аналогичные правилам отбора, которым удовлетворяют собственные операторы оператора четности). Матричные элементы операторов  $A_{k'}$ , взятые между состояниями  $|k''\rangle$  и  $|k'''\rangle$ , обращаются в нуль, если в них импульс не сохраняется. В этом легко убедиться, используя для оператора  $A_{k'}$  формулу (14.18г). Тогда будем иметь

$$\begin{aligned} \hbar k' \langle k'' | A_{k'} | k''' \rangle &= \langle k''' | [p_x, A_{k'}] | k'' \rangle = \\ &= \hbar (k''' - k'') \langle k''' | A_{k'} | k'' \rangle = 0, \quad \text{если } k' \neq k''' - k''. \end{aligned} \quad (14.19)$$

Изложенные выше соображения легко можно обобщить на преобразования трансляции, совершаемые по всем возможным направлениям в трехмерном пространстве. Операторы всех трансляций коммутируют между собой, т. е. группа трансляций — «абелева» группа; следовательно, все операторы трансляций можно одновременно диагонализировать. Генераторами бесконечно малых, инфинитезимальных, трансляций по трем независимым направлениям являются просто операторы составляющих импульса. Так как гамильтониан коммутирует с операторами всех возможных трансляций, то непосредственно получается векторный закон сохранения импульса.

Могут встретиться два различных случая: 1) гамильтониан коммутирует со всеми операторами группы непрерывных трансляций; 2) гамильтониан коммутирует только с определенным дискретным набором трансляций. В случае 1 имеет место самый обычный закон сохранения импульса, а одновременными собственными функциями гамильтониана и операторов трансляций будут обыкновенные плоские волны. В случае 2, который встречается, в частности, для бесконечной кристаллической решетки, обладающей трансляционной симметрией, можно, хотя и не однозначно, определить векторы некоторого «импульса», как говорят, «по модулю векторов обратной решетки», т. е. такие импульсы, которые сохраняются с точностью до добавления произвольного кратного вектора обратной решетки. Собственные функции дискретного набора операторов трансляций имеют вид, подобный (14.15), нужно только эту фор-

мулу обобщить на трехмерный случай; в обобщенную формулу войдет периодическая функция с периодом, определяемым элементарной ячейкой кристаллической решетки.

Все полученные выше результаты для простой одночастичной системы легко обобщить на случай многочастичных систем. Операторы трансляций будут теперь сдвигать положения всех частиц многочастичной системы на одну и ту же величину. Как следствие мы получаем закон сохранения полного импульса всей многочастичной системы.

Четыре заключения, которые мы сделали из нашего обсуждения преобразований четности в § 2 настоящей главы, очевидным образом справедливы и в отношении преобразований трансляций. Однако трансляции характеризуют более глубокую симметрию системы, а потому получают более сильные ограничения симметрии, налагаемые на решения уравнения Шредингера. Поясним это.

Преобразование пространственной инверсии — это дискретное преобразование, которое характеризуется оператором, имеющим только два собственных значения. Если наш гамильтониан инвариантен относительно преобразования пространственной инверсии, то линейное пространство его собственных функций разбивается на два разделенных подпространства, и гамильтониан можно диагонализировать отдельно в каждом из этих подпространств. Если мы посмотрим на уравнение Шредингера как на дифференциальное уравнение, то симметрия четности позволит нам рассматривать отдельно четные и нечетные решения. Для каждого из них нам нужно решить дифференциальное уравнение только в интервале  $0 < x < \infty$ ; симметрия позволяет нам находить значения решений при отрицательных  $x$ . Таким образом, и при алгебраическом подходе, и при подходе, использующем дифференциальное уравнение, симметрия для преобразования четности позволяет разделить нашу первоначальную задачу на две, никак не связанные друг с другом, каждая из которых «наполовину проще», чем первоначальная.

Дискретные преобразования трансляций образуют дискретную группу преобразований, составленную из дискретного бесконечного набора коммутирующих друг с другом операторов, каждый из которых имеет непрерывный ограниченный спектр собственных значений. Гамильтониан, инвариантный относительно рассматриваемой группы дискретных трансляций, можно диагонализировать отдельно в каждом из бесконечного числа не пересекающихся друг с другом подпространств; эти подпространства характеризуются своими собственными значениями операторов трансляций. Дифференциальное уравнение Шредингера необходимо при этом решать только на конечном интервале, простирающемся от  $-1/2a$  до  $+1/2a$ , а значения искомых решений при других значениях  $x$

нужно находить просто по формуле (14.15), справедливой ввиду предположенной симметрии нашей задачи. Таким образом, при наличии дискретной трансляционной симметрии исходная задача разбивается на бесконечное число отдельных самостоятельных задач, каждая из которых «бесконечно проще» первоначальной.

Полная одномерная непрерывная группа трансляций задается одним эрмитовым оператором, который является генератором бесконечно малой, инфинитезимальной трансляции и который имеет неограниченный непрерывный спектр. Если гамильтониан инвариантен относительно преобразований любых трансляций, то он полностью диагонализуется в силу этой своей симметрии в случае системы с одной степенью свободы. В этом случае (например, в задаче о движении одной частицы в одном измерении), исходя только из соображений трансляционной инвариантности, можно найти все собственные функции гамильтониана, т. е. они будут плоскими волнами. В случае одномерной многочастичной системы соображения трансляционной инвариантности позволяют отделить одну степень свободы от остальных, а именно отделить движение центра масс так, что уравнение Шредингера нужно будет решать только для остальных степеней свободы.

#### § 4. Преобразования четности и трансляций. Преобразования поворотов и группы Ли

Рассмотрим гамильтониан, одновременно инвариантный как относительно преобразования пространственной инверсии, так и относительно преобразований трансляций, т. е. пусть

$$[H, P] = [H, T_a] = 0. \quad (14.20)$$

Мы можем тогда рассмотреть новую группу преобразований, включив в нее и операторы трансляций, и оператор пространственной инверсии, т. е. операторы вида  $PT_a^n$ , скомбинированные из операторов  $P$  и  $T_a$ . В точности так же, как в разобранном простом примере группы преобразований трансляций, мы можем попытаться отыскать одновременные собственные функции операторов  $P$ ,  $T_a$  и  $H$ . Но при этом мы сталкиваемся с тем, что новая расширенная группа преобразований теперь больше не является абелевой, так как

$$T_a P = P T_{-a}, \quad (14.21a)$$

$$[P, T_a] \neq 0. \quad (14.21b)$$

Импульс и четность не коммутируют. Собственное состояние импульса не будет обладать определенной четностью, а собственное состояние четности не будет иметь определенного значения импульса (кроме тривиального случая нулевого импульса). Таким обра-

зом, мы можем построить только такие решения уравнения Шредингера для нашей системы, которые будут иметь либо определенное значение импульса, либо определенное значение четности, но не оба этих значения сразу. Решения с определенными значениями импульса характеризуются тем, что для них движение центра масс описывается бегущей плоской волной, т. е. функцией  $e^{ikx}$ , а решения с определенной четностью тем, что для них движение центра масс описывается стоячей волной, т. е. функциями  $\cos kx$  и  $\sin kx$ . Собственные состояния с определенными значениями четности, обладающие одним и тем же собственным значением энергии, должны быть, очевидно, связаны простым линейным преобразованием. Спектр собственных значений гамильтониана, таким образом, будет двукратно вырожден. Для каждого положительного собственного значения импульса  $k > 0$  будут иметься две собственные функции гамильтониана  $H$ , которые будут иметь вид  $e^{ikx}\phi_a$  и  $e^{-ikx}\phi_a$ , где функция  $\phi_a$  описывает все степени свободы системы, не связанные с движением центра масс. Так получается потому, что мы рассматриваем собственные состояния импульса. Соответствующие собственные состояния четности будут  $\phi_a \sin kx$  и  $\phi_a \cos kx$ .

Из рассмотренного примера непосредственно видно, что, когда гамильтониан коммутирует с некоторыми двумя операторами преобразований, которые не коммутируют друг с другом, тогда спектр собственных значений гамильтониана будет распадаться на «мультиплеты вырожденных состояний». Более того, мы можем сделать ряд важных заключений о структуре этих мультиплетов, не используя при этом никаких сведений о гамильтониане или о динамике системы. Когда гамильтониан инвариантен относительно определенного преобразования симметрии, например пространственной инверсии или трансляций, тогда при действии операторов этих преобразований любая собственная функция гамильтониана преобразуется в другую его собственную функцию с тем же самым собственным значением. Когда имеются два некомутирующих преобразования симметрии, например пространственная инверсия и трансляция, оба оператора этих преобразований никакое состояние не могут оставить инвариантным (кроме специальных случаев, например собственной функции, отвечающей нулевому импульсу), и поэтому при последовательном применении таких операторов получаются новые состояния, которые образуют «мультиплет вырожденных функций» нашего гамильтониана. Свойства мультиплетов, которые можно вывести из такого рода рассуждений, целиком определяются коммутационными соотношениями операторов преобразований симметрии; другие свойства гамильтониана совсем не нужны.

Давайте теперь более обстоятельно изучим наш конкретный пример и покажем, как много свойств собственных функций

гамильтониана  $H$  можно действительно установить, используя «переплетение» свойств преобразований трансляции и пространственной инверсии.

Рассмотрим какую-нибудь собственную функцию гамильтониана  $H$ , которая является одновременно собственной функцией оператора  $T_a$  с собственным значением  $e^{ika}$ :

$$H |k\rangle = E |k\rangle, \quad (14.22a)$$

$$T_a |k\rangle = e^{ika} |k\rangle. \quad (14.22б)$$

Тогда

$$HP |k\rangle = EP |k\rangle, \quad (14.22в)$$

$$T_a P |k\rangle = P T_{-a} |k\rangle = -e^{-ika} P |k\rangle. \quad (14.22г)$$

Спектр собственных значений гамильтониана  $H$  состоит, таким образом, из дублетов вырожденных состояний, которые являются собственными функциями оператора  $T_a$  с собственными значениями  $e^{\pm ika}$ . Для группы непрерывных трансляций мы имеем два состояния с равными и противоположными импульсами. Оба эти состояния переходят одно в другое при преобразовании пространственной инверсии.

Единственное исключение из общего правила, согласно которому все собственные значения двукратно вырождены, дает случай  $k = 0$ , в котором  $e^{ika} = 1 = e^{-ika}$ . Состояния (14.22б) и (14.22г) будут при этом совпадать, и это совпавшее состояние будет одновременно собственной функцией операторов  $P$  и  $T_a$ . Операторы  $P$  и  $T_a$  не коммутируют, но так получилось потому, что коммутатор  $[P, T_a] = 0$  при действии на состояние с  $k = 0$ . Состояние  $|k = 0\rangle$  — собственная функция оператора  $[P, T_a]$  с собственным значением, равным нулю.

Итак, мы видим, что собственные функции оператора  $H$  распадаются на мультиплеты вырожденных состояний, каждый из которых характеризуется числом  $k \geq 0$ . Эти мультиплеты будут «дублетами» при  $k \neq 0$  и «синглетами» при  $k = 0$ . В выбранном нами базисе собственных функций оператор  $p_x$  диагональный, а оператор  $P$  «почти диагональный», т. е.  $P$  имеет не обращающиеся в нуль матричные элементы только между состояниями, принадлежащими одному и тому же мультиплету. Мы могли бы рассмотреть базис собственных функций, для которых оператор  $P$  был бы диагональным; тогда, наоборот, оператор  $p_x$  будет «почти диагональным».

Давайте будем характеризовать рассматриваемые собственные функции оператора  $H$  следующими квантовыми числами: абсолютной величиной импульса  $\hbar k'$ , знаком импульса  $\sigma' = \pm 1$  и набором квантовых чисел  $\alpha'$ , которые характеризуют оставшиеся степени свободы системы. Квантовое число  $k'$  задает тип отдельного мультиплета собственных функций, а квантовое число  $\sigma'$

характеризует отдельные функции в этом мультиплете. Матричные элементы операторов  $p_x$  и  $P$  имеют совершенно определенные значения в базисе собственных функций, так как

$$p_x |k', \sigma', \alpha'\rangle = \hbar \sigma' k' |k', \sigma', \alpha'\rangle, \quad (14.23a)$$

$$P |k', \sigma', \alpha'\rangle = |k', -\sigma', \alpha'\rangle. \quad (14.23б)$$

Оператор  $p_x$  диагонален и имеет собственные значения  $\hbar \sigma' k'$ , а оператор  $P$  «почти диагонален», и его матричные элементы равны 1, если они берутся между состояниями одного и того же мультиплета, и равны 0, если они берутся между состояниями разных мультиплетов.

Вместо того чтобы выбирать знак импульса для определения состояния внутри мультиплета, мы можем взять четность. В этом случае

$$p_x |k', P', \alpha'\rangle = \hbar k' |k', -P', \alpha'\rangle, \quad (14.24a)$$

$$P |k', P', \alpha'\rangle = P' |k', P', \alpha'\rangle. \quad (14.24б)$$

Теперь оператор  $P$  диагонален, а оператор  $p_x$  «почти диагонален».

«Собственные операторы» четности и импульса также распадаются на «мультиплеты». Для каждого оператора  $A_{k'}$  [см. (14.18)] мы можем указать соответствующий ему оператор  $A_{-k'}$ , причем

$$A_{-k'} = P A_{k'} P, \quad (14.25a)$$

$$[p_x, A_{-k'}] = [p_x, P A_{k'} P] = -\hbar k' A_{-k'}. \quad (14.25б)$$

«Операторный» мультиплет  $A_{k'}$ ,  $A_{-k'}$  имеет структуру, сходную со структурой мультиплета собственных волновых функций.

Установим теперь соотношение, имеющее место для матричных элементов какого-либо «операторного мультиплета». Рассмотрим матричный элемент общего вида

$$\langle k', \sigma', \alpha' | A_{k''\sigma''} | k'', \sigma'', \alpha'' \rangle. \quad (14.26)$$

Если мы рассмотрим все матричные элементы для компонент  $\sigma''$  операторного мультиплета  $A_{k''}$ , составленные между всеми парами состояний  $\alpha'$  и  $\alpha''$  мультиплетов  $k'$  и  $k''$ , то будем иметь всего *восемь* матричных элементов. Ниже мы убедимся, что все они *зависимы*, так как пропорциональны одной величине, которая только и зависит от динамических свойств системы, причем множители пропорциональности определяются только свойствами алгебры операторов  $P$  и  $p_x$ . Прежде всего обратим внимание на то, что лишь два из восьми матричных элементов могут быть отличными от нуля, потому что, согласно закону сохранения импульса (14.19), для ненулевых матричных элементов имеем  $k' \sigma' = k'' \sigma'' + k''' \sigma'''$ .

Эти два матричных элемента равны друг другу, так как

$$\begin{aligned} \langle k', \sigma', \alpha' | A_{k''\sigma''} | k'', \sigma'', \alpha'' \rangle &= \\ &= \langle k', \sigma', \alpha' | P (P A_{k''\sigma''} P) P | k'', \sigma'', \alpha'' \rangle = \\ &= \langle k', -\sigma', \alpha' | A_{k''\sigma''} | k'', -\sigma'', \alpha'' \rangle. \end{aligned} \quad (14.27)$$

Таким образом, можем написать следующую формулу:

$$\begin{aligned} \langle k' \sigma' \alpha' | A_{k''\sigma''} | k'' \sigma'' \alpha'' \rangle &= \\ &= V(k', \sigma', k'', \sigma'', k''', \sigma''') \langle k' \alpha' || A_{k''\sigma''} || k'' \alpha'' \rangle, \end{aligned} \quad (14.28)$$

где  $V(k', \sigma', k'', \sigma'', k''', \sigma''')$  — некоторые коэффициенты, зависящие от квантовых чисел импульса и четности, т. е. от квантовых чисел  $k', k'', k''', \sigma', \sigma'', \sigma'''$  и не зависящие от квантовых чисел  $\alpha', \alpha''$ , а также от квантового числа  $\sigma'''$  «тензорного оператора»  $A_{k''\sigma''}$ . Записанный в правой части (14.28) с двойными вертикальными черточками так называемый «редуцированный матричный элемент»  $\langle k' \alpha' || A_{k''\sigma''} || k'' \alpha'' \rangle$  зависит только от квантовых чисел, характеризующих сами мультиплеты, т. е. от квантовых чисел  $k', k'', k'''$ , но не от квантовых чисел, характеризующих компоненты этих мультиплетов. В рассматриваемом нами случае все коэффициенты  $V$  обращаются в нуль, кроме двух, для которых аргументы удовлетворяют закону сохранения импульса; положим, что они равны единице в этом последнем случае. Формула (14.28) — это упрощенный вариант известной *теоремы Вигнера — Экарта*.

На разобранном нами простом примере двух некоммутирующих преобразований симметрии мы смогли увидеть, как свойства инвариантности гамильтониана приводят ко многим полезным результатам. Наше рассмотрение можно подытожить в нескольких предложениях, которые имеют общую значимость.

Всякий раз, когда гамильтониан физической системы инвариантен относительно двух или более преобразований, которые не коммутируют друг с другом, мы можем построить группу некоммутирующих преобразований (т. е. множество некоммутирующих между собой операторов с определенными математическими свойствами), по отношению к которой наш гамильтониан инвариантен. При этом можно сказать следующее:

1. Спектр собственных значений гамильтониана состоит из мультиплетов вырожденных состояний.

2. Структура возможных мультиплетов (т. е. являются ли они синглетами или дублетами, как в нашем примере с импульсом и четностью, или же  $2j + 1$ -мультиплетами, как в случае момента количества движения) полностью задается теми коммутационными соотношениями, которым удовлетворяют операторы различных преобразований симметрии, и она совершенно не связана с другими свойствами гамильтониана. Синглеты должны быть собствен-

ными функциями всех коммутаторов, причем должны иметь собственные значения, равные нулю.

3. Гамильтониан системы диагонален в базисе собственных функций, в котором операторы группы либо диагональны, либо «почти диагональны». Почти диагональные операторы имеют ненулевые матричные элементы только между состояниями, которые принадлежат одному и тому же мультиплету вырожденных собственных состояний гамильтониана. Относительные величины матричных элементов указанных операторов полностью определяются алгеброй операторов преобразований симметрии и не зависят совершенно от структуры гамильтониана.

4. Можно рассмотреть «мультиплеты операторов», называемые «неприводимыми тензорными операторами», которые формально определяются аналогично мультиплетам собственных волновых функций. Мультиплеты операторов имеют в точности такую же структуру, как и мультиплеты волновых функций.

5. Матричные элементы отдельного оператора данного неприводимого тензорного оператора, берущиеся между состояниями двух мультиплетов собственных функций, пропорциональны одному (а в некоторых особых случаях нескольким) «редуцированному» матричному элементу, который не зависит от квантовых чисел, характеризующих отдельные компоненты мультиплета операторов и компоненты мультиплетов собственных функций. Коэффициенты, стоящие при редуцированном матричном элементе, не зависят от структуры собственных функций и рассматриваемых операторов; они являются функциями, которые зависят только от квантовых чисел, задаваемых группой преобразований симметрии. Эти коэффициенты называются «коэффициентами Вигнера» или «обобщенными коэффициентами Клебша — Гордона».

6. Существуют простые правила для построения мультиплетов сложной системы из мультиплетов ее составных частей, которые определяются только алгеброй группы преобразований симметрии.

Общеизвестные в квантовой механике результаты в отношении непрерывной некоммутативной группы преобразований пространственных поворотов согласуются полностью со всем тем, что мы только что сказали. Когда гамильтониан системы коммутирует с операторами преобразований поворотов, то сохраняется момент количества движения; операторы момента количества движения порождают инфинитезимальные, бесконечно малые, пространственные повороты. Спектр гамильтониана, инвариантного относительно преобразований пространственных поворотов, распадается на мультиплеты следующей структуры: каждый мультиплет, характеризуемый квантовыми числами  $j$  и  $m$ , составлен из  $2j + 1$  состояний. Мультиплеты с  $j = 0$  являются синглетами, соответствующие им собственные функции гамильтониана будут



собственными функциями коммутаторов операторов момента количества движения с нулевыми собственными значениями. «Операторные мультиплеты» в теории квантовомеханического момента количества движения это — «неприводимые тензорные операторы». Последние при действии на собственные функции момента количества движения изменяют квантовые числа момента количества движения по обычным правилам сложения моментов. Эти правила сложения нужно использовать также при комбинировании мультиплетов друг с другом; согласно этим правилам, матричные элементы не обращаются в нуль при выполнении простого правила отбора, выражающего известное неравенство треугольника. При комбинировании мультиплетов операторов с мультиплетами собственных функций гамильтониана  $H$  оказывается справедливой теорема Вигнера — Эккарта.

В точности такие же результаты получаются и для других непрерывных групп преобразований симметрии (непрерывных групп Ли). Только из алгебры генераторов группы можно получить структуру «разрешенных» мультиплетов; можно также рассмотреть и обобщенные неприводимые тензорные операторы, матричные элементы которых подчиняются обобщенной теореме Вигнера — Эккарта. Примерами непрерывных групп преобразований симметрии могут служить группа изоспина и группа  $SU(3)$  в физике элементарных частиц, группа симметрии  $SU(3)$  для трехмерного гармонического осциллятора, группа симметрии  $O(4)$  для атома водорода и т. д.

### § 5. Преобразования комплексного сопряжения и обращения времени

Предположим, что  $\psi$  — решение временного уравнения Шредингера, т. е.

$$H\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (14.29a)$$

Тогда, если гамильтониан  $H$  действительный, т. е. эрмитов оператор, то, беря комплексное сопряжение от обеих частей (14.29a), получаем

$$H\psi^*(x, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial (-t)}. \quad (14.29b)$$

Следовательно, функция  $\psi^*(x, -t)$  будет тоже некоторым решением уравнения Шредингера; она описывает движение, «обращенное во времени». Обе волновые функции  $\psi(x, t)$  и  $\psi^*(x, -t)$  с точностью до фазового множителя равны друг другу при  $t=0$ . В любой момент времени  $t$  значение одной волновой функции  $\psi$  равно комплексному сопряжению значения другой функции в

момент времени  $-t$ . Таким образом, если функция  $\psi(x, t)$  описывает движущийся в пространстве волновой пакет, то функция  $\psi^*(x, -t)$  описывает волновой пакет, движущийся в противоположном направлении.

При попытке построить формальную теорию рассматриваемого преобразования мы сталкиваемся с трудностью, связанной с тем, что операция комплексного сопряжения не является линейной операцией. Если мы формально рассмотрим оператор  $K_0$ , определяемый в шредингеровском представлении соотношением

$$K_0\psi = \psi^*, \quad (14.30a)$$

то для него будем иметь

$$K_0(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1^*\psi_1^* + a_2^*\psi_2^* = a_1^*K_0\psi_1 + a_2^*K_0\psi_2, \quad (14.30b)$$

т. е. оператор  $K_0$  не является линейным оператором, и он не коммутирует с операцией умножения на  $c$ -число, если это число не действительное, а комплексное, так как

$$K_0a = a^*K_0, \quad (14.31)$$

где  $a$  — любое комплексное число. Такого типа операторы называются «антилинейными». Дважды применяя оператор комплексного сопряжения, получаем тождественный оператор, т. е.

$$K_0^2 = 1. \quad (14.32)$$

Собственные значения оператора  $K_0$  поэтому равны  $\pm 1$  для действительных или мнимых функций соответственно. При этом собственное значение антилинейного оператора можно умножать на произвольный фазовый множитель, т. е. на комплексное число, по модулю равное единице, потому что собственное значение изменяется, если мы умножаем собственную функцию на  $i$ . Антилинейный оператор с собственными значениями, по модулю равными единице, называется «антиунитарным».

При преобразовании комплексного сопряжения обычные линейные операторы ведут себя таким образом, что для них мы имеем операторное соотношение

$$K_0AK_0 = A^*, \quad (14.33)$$

в котором  $A^*$  означает комплексно сопряженный оператор, а не эрмитово-сопряженный оператор. В соответствии с (14.33) оператор импульса  $p = -i\hbar\nabla$  чисто мнимый в шредингеровском представлении, хотя он и эрмитов, т. е. «действительный оператор» в обычном смысле. Оператор координаты  $x$  одновременно и действительный, и эрмитовый в шредингеровском представлении. Таким образом,

$$K_0pK_0 = -p, \quad (14.34a)$$

$$K_0xK_0 = +x. \quad (14.34b)$$

Соотношения (14.34а) и (14.34б) согласуются с нашими интуитивными представлениями об операции обращения времени, в результате которой знак импульса частицы изменяется, а знак координаты нет.

Будет ли оператор «действительным» или «мнимым», зависит от выбора базисных функций. Так, в *импульсном* представлении оператор координаты мнимый, так как  $x = i\hbar\partial/\partial p$ , а оператор импульса действительный. В *шредингеровском*, или *координатном*, представлении оператор координаты  $x$  действительный, а оператор импульса  $p$  мнимый; в этом представлении оператор  $K_0$  действительно является оператором обращения времени. Таким образом, формальное представление оператора обращения времени зависит от выбора базисных функций.

Когда гамильтониан действительный, т. е. когда он инвариантен относительно операции обращения времени (14.33), можно найти для него полную систему действительных базисных собственных функций. В этом легко убедиться следующим образом. Собственные функции  $\psi$  гамильтониана  $H$  удовлетворяют уравнению

$$H\psi = E\psi; \quad (14.35a)$$

следовательно,

$$H\psi^* = E\psi^*. \quad (14.35b)$$

Если исходная функция  $\psi$  не является действительной, то действительными будут функции  $\psi + \psi^*$  и  $i(\psi - \psi^*)$ . Они — собственные функции гамильтониана  $H$ ; из них можно построить полную систему базисных функций.

Так мы доказываем факт существования действительных базисных собственных функций в случае бесспиновой частицы. Как будет показано ниже, ситуация существенно усложняется в случае частицы, обладающей спином.

## § 6. Калибровочные преобразования

Рассмотрим гамильтониан частицы, движущейся в магнитном поле

$$H = (p - eA/c)^2/2m. \quad (14.36)$$

Если векторный потенциал  $A$  постоянный, т. е. не зависит от пространственных координат, то никакое электромагнитное поле не действует на частицу, поскольку все пространственные производные  $A$  обращаются в нуль. В таком случае гамильтониан (14.36) должен быть эквивалентен гамильтониану свободной частицы, т. е. он должен получаться из последнего гамильтониана с помощью определенного калибровочного преобразования.

Собственные функции гамильтониана (14.36) с постоянным векторным потенциалом  $A$ , очевидно, оказываются плоскими волнами:

$$\psi_k = e^{ik \cdot x}; \quad (14.37a)$$

для них

$$H\psi_k = E\psi_k = [(\hbar k - eA/c)^2/2m] \psi_k, \quad (14.37b)$$

т. е. эти собственные функции те же, что и для свободной частицы, однако, как видно из (14.37b), теперь соотношение между энергией и волновым вектором  $k$  будет другим. Почему так получается, легко понять. Действительно, *кинематический* импульс не совпадает с *каноническим* импульсом  $p$ , если имеется отличный от нуля векторный потенциал  $A$ . В этом случае *оператор скорости* будет иметь вид

$$v = i[H, x]/\hbar = (p - eA/c)/m, \quad (14.38a)$$

и, следовательно, согласно (14.37b),

$$E = \frac{1}{2} mv^2. \quad (14.38b)$$

Таким образом, энергия частицы, движущейся в поле, созданном потенциалом  $A$ , имеет обычный вид, когда она выражается через скорость частицы  $v$ , а не через волновой вектор  $k$ . Можно добиться, чтобы энергия частицы приняла стандартный вид, если провести каноническое преобразование

$$\psi \rightarrow e^{iS}\psi, \quad (14.39a)$$

в котором

$$S = -eA \cdot x/\hbar c. \quad (14.39b)$$

Функция (14.37a) преобразуется тогда следующим образом:

$$e^{ik \cdot x} \rightarrow e^{ik' \cdot x}, \quad (14.40a)$$

где

$$k' = k - eA/\hbar c = mv/\hbar. \quad (14.40b)$$

Как видим, новый волновой вектор  $k'$  связан со скоростью  $v$  обычным соотношением. При преобразовании (14.39) гамильтониан (14.36) превращается в обычный гамильтониан для свободной частицы, т. е.

$$e^{iS}He^{-iS} = p^2/2m. \quad (14.41)$$

Каноническое преобразование (14.39) является, таким образом, калибровочным преобразованием, позволяющим исключить из гамильтониана нефизический постоянный векторный потенциал

$A$ , который не порождает никакого наблюдаемого электромагнитного поля.

На калибровочное преобразование (14.39б) можно посмотреть так же, как на каноническое преобразование, которое дает нам два разных способа описания одного и того же физического состояния, а не двух разных состояний одной и той же системы. Гамильтониан не инвариантен относительно этого преобразования, и его собственные функции тоже, вообще говоря, не инвариантны, хотя в нашем тривиальном примере они инвариантны, так как остаются плоскими волнами. Калибровочное преобразование является таким каноническим преобразованием, в результате которого все физические экспериментально измеримые величины остаются инвариантными. Таким образом, при калибровочном преобразовании некоторые величины остаются инвариантными, в то время как при преобразовании декартовых координат в сферические координаты ничто не остается инвариантным.

Рассмотрим теперь калибровочное преобразование (14.39а), для которого

$$S(x) = -e\nabla\phi \cdot x/\hbar c, \quad (14.42)$$

причем  $\phi$  — произвольная скалярная функция от  $x$ . В результате такого преобразования любая волновая функция умножается только на некоторый фазовый множитель, а потому плотность вероятности для нее не изменяется, т. е. данное преобразование не меняет вида любой функции от  $x$ . Гамильтониан, однако, изменяется: в нем преобразуются слагаемые с векторным потенциалом, но никак не преобразуются входящие в него электромагнитные поля. Калибровочные преобразования — это такие преобразования, которые преобразуют только ненаблюдаемые физические величины. Они добавляют к электромагнитным потенциалам градиенты скалярных функций, что не приводит к изменению электромагнитных полей. Кроме того, калибровочные преобразования изменяют фазовые множители волновых функций и изменяют канонические (но не кинематические) импульсы. Хотя и может показаться странным, что мы относим, таким образом, импульс частицы к ненаблюдаемым величинам, но ведь именно кинематический импульс  $tx$  только и является наблюдаемой величиной. Канонический импульс  $p$  будет наблюдаться только тогда, когда мы возьмем такую калибровку, в которой  $p = tx$ . Пока нет магнитного поля, всегда можно выбрать калибровку так, чтобы кинематический и канонический импульсы частицы были равны. При наличии магнитного поля этого уже сделать нельзя.

Волновой вектор  $k$  и дебройлевская длина волны частицы не являются калибровочно инвариантными величинами. Поэтому интуитивную картину интерференции дебройлевских волн нужно принимать с оговоркой, когда у нас есть магнитное поле. В отсут-

ствии магнитного поля калибровка, в которой не появляется векторный потенциал  $A$ , конечно, является *физически* предпочтительной по сравнению с другими калибровками, например калибровкой, в которой мы брали наш исходный гамильтониан (14.36). При указанном выборе калибровки в отсутствие магнитного поля дебройлевскую длину волны можно определить совершенно однозначно. Когда магнитное поле есть, не существует никакого *априорного* выбора калибровки, а поэтому мы не можем приписать однозначного смысла дебройлевской длине волны.

### § 7. Спин и внутренние степени свободы частицы

Посмотрим теперь, как преобразуются спин и другие внутренние степени свободы частицы при преобразованиях, которые мы рассмотрели выше. Для композитной частицы с известной внутренней структурой, описываемой некоторой волновой функцией, например для  $\alpha$ -частицы, любое преобразование можно применить непосредственно и к ее внутренней волновой функции. Каждое преобразование для композитной частицы распадается, таким образом, на два отдельных преобразования: «орбитальное», связанное с движением центра масс частицы, и «внутреннее», связанное с внутренним движением составных частей частицы относительно ее центра масс. Для «элементарной частицы», для которой внутренняя структура нам не известна, подобное разделение полного преобразования на «орбитальное» и «внутреннее» тоже можно проводить; однако при этом неясно а priori, что понимать под «внутренним преобразованием»; его приходится определять порозному в различных случаях.

Четность состояния композитной частицы по определению равна произведению внутренней четности и орбитальной четности. Когда внутренняя структура частицы, например элементарной частицы, нам не известна, внутреннюю четность этой частицы часто, оказывается, можно определить непосредственно из экспериментов, в которых эта частица рождается или уничтожается, если, разумеется, в исследуемом экспериментальном физическом процессе четность сохраняется. Например, экспериментально найдено, что *внутренняя четность нейтрального пиона  $\pi^0$  равна  $-1$* .

Внутреннюю четность элементарной частицы, которая рождается и уничтожается всегда только в сопровождении какой-то другой определенной частицы (или частиц), принципиально нельзя измерить экспериментально. В частности, *нельзя измерить внутреннюю четность электрона*, так как электроны рождаются и уничтожаются только электрон-позитронными парами. Конечно, полную внутреннюю четность электрон-позитронной пары экспериментально найти легко, и она, как хорошо известно, равна  $-1$ .

Внутреннюю четность электрически заряженных пионов  $\pi^\pm$  тоже нельзя измерить, потому что они не могут испускаться и поглощаться без того, чтобы в системе где-то не произошло сопутствующее изменение электрического заряда. Например, заряженный пион  $\pi^+$  может испуститься протоном, который при этом превращается в нейтрон. Из этого эксперимента можно заключить, что пион имеет внутреннюю четность, равную  $-1$ , если сделать предположение, что протон и нейтрон имеют одинаковую внутреннюю четность (равную  $+1$  или  $-1$ ); напротив, мы должны приписать испущенному пиону четность  $+1$ , если будем считать, что внутренняя четности протона и нейтрона противоположны. Эксперимент не позволяет отдать предпочтения какой-либо одной из этих возможностей. В физике элементарных частиц, правда, условились считать, что внутренние четности пионов  $\pi^+$  и  $\pi^-$  равны  $-1$ , так как при этом их четность равна (экспериментально найденной) четности пиона  $\pi^0$ , а следовательно, в настоящее время принято считать, что нейтрон и протон имеют одинаковые четности.

Частица вовсе не обязательно должна иметь определенную внутреннюю четность. В качестве общеизвестного примера частицы, которая не обладает никакой внутренней четностью, можно рассмотреть органическую молекулу со сложной внутренней спиральной структурой. При пространственной инверсии эта «частица» преобразуется в другую, причем левая спираль переходит в правую, и наоборот. Если гамильтониан системы инвариантен относительно пространственной инверсии, то эти два «зеркально отраженных» состояния должны иметь одну и ту же энергию (массу). «Массовые дублеты» состояний указанного типа должны обязательно появляться, если мы имеем дело с частицей, состояния которой не являются собственными состояниями оператора внутренней четности, коммутирующего с гамильтонианом.

Момент количества движения частицы есть сумма орбитального момента количества движения и «внутреннего» момента количества движения, или «спина». Спиновый момент преобразуется при пространственной инверсии точно так же, как орбитальный момент количества движения. Поскольку оператор четности  $P$  коммутирует с операторами орбитального момента количества движения, то мы требуем, чтобы он коммутировал также и со всеми операторами спинового момента.

Спиновые операторы преобразуются при поворотах в пространстве в точности так же, как операторы орбитального момента количества движения. Операторы, порождающие инфинитезимальные повороты системы, будут, следовательно, операторами полного момента количества движения этой системы, т. е. будут суммами спинового и орбитального моментов количества движения. Преобразование при поворотах в пространстве волновой функции частицы, обладающей спином, можно будет полностью описать, если

мы будем знать, как действуют операторы полного момента количества движения на эти волновые функции.

Некоторая двузначность возникает, правда, для частиц с полуцелым спином. Фазовый множитель повернутого состояния этой частицы не является однозначной функцией углов поворота. Например, оператор, порождающий бесконечно малый поворот вокруг оси  $x$ , есть составляющая в направлении  $x$  полного момента количества движения, т. е. это оператор  $J_x$ . При повороте на угол  $\theta$  вокруг оси  $x$  любое состояние  $\psi$  частицы преобразуется по формуле

$$\psi \rightarrow e^{iJ_x\theta}\psi. \quad (14.43)$$

Положим теперь в (14.43)  $\theta = 2\pi$ . Состояние частицы с *целым* спином можно представить в виде линейной комбинации собственных функций оператора  $J_x$  с целыми собственными значениями. Следовательно, действие оператора  $e^{2\pi i J_x}$  на такое состояние сводится к умножению его волновой функции на  $+1$ , т. е. это состояние никак не изменяется при повороте на угол  $2\pi$ , что и следовало ожидать. Состояние частицы с *полуцелым* спином можно представить в виде линейной комбинации собственных функций оператора  $J_x$  с *полуцелыми* собственными значениями. Теперь действие оператора  $e^{2\pi i J_x}$  на такое состояние сводится к умножению его волновой функции на  $-1$ , т. е. изменяется знак перед состоянием. Поворот на угол  $2\pi$  не должен менять физического состояния, но может, конечно, умножить его волновую функцию на множитель  $-1$ . Повороты на углы  $\theta$ ,  $\theta - 2\pi$  и  $\theta + 2\pi$  должны быть эквивалентными для любого физического состояния, однако преобразованные волновые функции могут отличаться друг от друга знаком.

Эта двузначность не оказывает, разумеется, никакого влияния ни на одну из экспериментально измеряемых физических величин. Действительно, в матричные элементы операторов волновые функции входят *квадратично*, если только не рассматривать процессы, в которых частицы рождаются и уничтожаются. Так как частицы с полуцелым спином всегда рождаются и уничтожаются парами, то для них в матричные элементы перехода, соответствующие процессам рождения и уничтожения, входит обязательно *четное* число волновых функций. Следовательно, если умножить все волновые функции частиц с полуцелым спином на множитель  $-1$ , то это не сможет изменить ни одного матричного элемента, т. е. не повлияет ни на один экспериментальный результат. Преобразование волновых функций частиц с полуцелым спином при оворотах в пространстве оказывается фактически двузначной операцией, но это не приводит ни к каким неоднозначностям в измеряемых физических величинах.



Поскольку поворот в пространстве на угол  $2\pi$  может изменить знак волновой функции и это не оказывает никакого влияния на результаты физических измерений, то можно спросить, а не возникают ли подобные изменения знаков при других преобразованиях, которые физически эквивалентны тождественным преобразованиям. Например, квадрат оператора четности  $P^2$  переводит систему обратно в ее первоначальное состояние. Мы могли бы, конечно, допустить, что для частицы со спином  $1/2$  оператор  $P^2$  эквивалентен повороту в пространстве на угол  $2\pi$ . Тогда при действии оператора  $P^2$  на состояния этих частиц знак изменился бы на обратный и этим состояниям нужно было бы приписать «мнимую внутреннюю четность», равную  $+i$ . Так можно сделать, но это нам ничего не даст. Квадрат оператора обращения времени тоже можно считать оператором, изменяющим знак волновой функции на противоположный, но при этом результаты физических измерений не изменяются по указанным выше причинам.

Внутренний момент количества движения является вектором; он должен преобразоваться при поворотах в пространстве как вектор. Ориентацию вектора момента количества движения можно определять либо по отношению к «внешней» системе координат, либо по отношению к «внутренней» системе координат, жестко связанной с нашей физической частицей. С такой возможностью двойного выбора системы координат мы сталкиваемся, например, при описании движения симметричного или несимметричного волчка, с помощью которого в квантовой механике моделируют молекулу или деформированное ядро. Составляющие вектора момента количества движения волчка можно отнести либо к направлениям осей  $x, y, z$  лабораторной, неподвижной системы координат, либо к направлениям «внутренних» осей, жестко связанных с волчком, скажем к «направлениям» его главных осей инерции, которые поворачиваются относительно лабораторной системы координат при движении волчка. В первом случае составляющие зависят от ориентации волчка относительно осей фиксированной в пространстве координатной системы, и, следовательно, они изменяются при поворотах волчка в пространстве. Во втором случае составляющие не зависят от ориентации осей координатной системы и поэтому не изменяются при поворотах волчка.

Спиновый момент преобразуется при обращении времени в точности так же, как орбитальный момент количества движения, т. е. он меняет свой знак. Данное выше формальное определение (14.30) оператора обращения времени нужно обобщить; теперь необходимо взять произведение оператора комплексного сопряжения  $K_0$  и некоторого спинового оператора. Поскольку  $K_0$  антиунитарный оператор, его определение зависит от выбора базисных функций, и поэтому нужно обязательно брать вполне определенные базисные функции также и для спиновых операторов, чтобы

формально определить оператор обращения времени. Обычно выбирают такое представление спиновых функций, в котором операторы  $S_x$  и  $S_z$  оказываются матрицами с действительными элементами, а оператор  $S_y$  — матрицей с чисто мнимыми элементами (т. е. матрицами Паули).

В этом представлении

$$K_0 S_x K_0 = S_x, \quad (14.44a)$$

$$K_0 S_y K_0 = -S_y, \quad (14.44б)$$

$$K_0 S_z K_0 = S_z. \quad (14.44в)$$

Оператор комплексного сопряжения изменяет знак оператора  $S_y$ , но не изменяет знаки операторов  $S_x$  и  $S_z$ . *Обобщенный оператор обращения времени*  $K$ , следовательно, нужно определить так, чтобы он был произведением оператора  $K_0$  и оператора, изменяющего знаки операторов  $S_x$  и  $S_z$ , но оставляющего неизменным знак оператора  $S_y$ , т. е. являющегося оператором поворота на угол  $\pi$  вокруг оси  $y$ . Таким образом, имеем

$$K = e^{i\pi S_y} K_0. \quad (14.45a)$$

Следовательно,

$$K S K^{-1} = -S, \quad (14.45б)$$

как это мы и хотели получить. Для частицы со спином  $1/2$  формула (14.45a) сводится к более простой формуле

$$K = i\sigma_y K_0. \quad (14.45в)$$

Так как  $iS_y$  — действительный оператор, оператор  $K_0$  коммутирует с оператором  $iS_y$  и, следовательно, с  $e^{i\pi S_y}$ . В силу того что  $K_0^2 = 1$ , имеем

$$K^2 = e^{2\pi i S_y} = \pm 1. \quad (14.46)$$

Если спин  $S$  целый,  $K^2 = 1$ , как и для бесспиновой частицы. Но если спин  $S$  полуцелый,  $K^2 = -1$ . Так как  $S$  является *полным спином частицы*, когда частица композитная (состоит из нескольких частиц), мы видим, что операция обращения времени носит различный характер в зависимости от того, из *четного* или *нечетного* числа частиц, обладающих полуцелым спином, составлена композитная частица.

Для целого спина  $S$  рассуждение с комплексным сопряжением уравнения Шредингера [см. (14.35a) и (14.35б)] можно обобщить и в результате построить полную систему *действительных* собственных функций для любого действительного гамильтониана, инвариантного относительно операции обращения времени.

Теперь вместо формул (14.35а) и (14.35б) имеем

$$H\psi = E\psi, \quad (14.47а)$$

$$H(K\psi) = E(K\psi). \quad (14.47б)$$

Состояния  $(1 + K)\psi$  и  $i(1 - K)\psi$  будут, следовательно, одновременно собственными функциями операторов  $H$  и  $K$ , причем действительными функциями, т. е. будут соответствовать положительному собственному значению  $K$ .

Если спин  $S$  полуцелый, то  $K^2 = -1$ , и мы вновь сталкиваемся с операцией, которая не изменяет физической частицы, но изменяет знак ее состояния. Так как  $K$  — антилинейный оператор, то вообще не существует собственных функций оператора  $K$ . Чтобы доказать это, предположим, что  $\psi$  — собственная функция оператора  $K$  с собственным значением  $c$ . Тогда получим

$$K^2\psi = KK\psi = Kc\psi = c^*K\psi = c^*c\psi \neq -\psi. \quad (14.48)$$

Для любой собственной функции  $\psi$  гамильтониана, инвариантного относительно обращения времени, мы всегда можем построить другую собственную функцию  $K\psi$  [см. (14.47а) и (14.47б)]. Так как  $\psi$  не может быть собственной функцией оператора  $K$  (при полуцелом  $S$ ), то оба состояния  $\psi$  и  $K\psi$  должны быть различными (фактически они ортогональны), а соответствующее собственное значение гамильтониана должно быть *двукратно* вырожденным. Все собственные значения гамильтониана  $H$  должны быть двукратно вырожденными для частицы с полуцелым спином, которая инвариантна относительно преобразования отражения времени. Это вырождение называется «крамерсовским вырождением».

Итак, для частицы с целым спином всегда можно найти одно-временные собственные функции операторов  $H$  и  $K$  (т. е. *действительный* базис собственных функций); для частицы с полуцелым спином такого *действительного* базиса не существует, поскольку  $K$  не имеет вообще собственных функций; в этом случае все собственные состояния гамильтониана  $H$  разбиваются на вырожденные *крамерсовские дублеты*, причем оба состояния одного и того же дублета переходят друг в друга при применении операции обращения времени.

### § 8. Преобразования дираковских спиновых волновых функций

Дираковский электрон имеет внутренние степени свободы, которые описываются уравнением Дирака и которые не имеют никаких аналогов в классической физике. Поэтому а priori нельзя никак определить, как действуют на эти внутренние степени свободы электрона такие преобразования, как пространственная

инверсия, повороты или операция обращения времени. Внутренние свойства дираковского электрона можно описать, потребовав, чтобы выполнялись известные законы сохранения для наблюдаемых процессов, в которых участвуют электроны, в частности для процессов рождения и уничтожения электрон-позитронных пар. Внутренние преобразования надо вводить таким образом, чтобы дираковский гамильтониан был инвариантным относительно *полных* преобразований.

Рассмотрим теперь подробнее внутренние преобразования дираковского гамильтониана. Используем дираковское представление гамильтониана с матрицами  $\rho$  и  $\sigma$ :

$$H_D = \rho_1 (\sigma \cdot p) c + \rho_3 mc^2. \quad (14.49)$$

Непосредственно легко проверить, что гамильтониан  $H_D$  коммутирует с оператором  $\rho_3 P$ , но не коммутирует с самим оператором орбитальной четности  $P$ . Если мы формально будем считать оператор  $\rho_3$  оператором *внутренней* четности, то оператор  $\rho_3 P$  будет тогда оператором *полной* четности, и гамильтониан  $H_D$  будет инвариантным относительно преобразования «полной пространственной инверсии».

Гамильтониан  $H_D$ , очевидно, инвариантен относительно поворотов в пространстве, так как оператор  $\sigma$  является вектором, а операторы  $\rho_1$  и  $\rho_3$  не изменяются при поворотах.

Чтобы построить оператор обращения времени, надо фиксировать базисные функции. Возьмем их такими, чтобы операторы  $\sigma_x$  и  $\sigma_z$  были действительными, а оператор  $\sigma_y$  — мнимым; при этом операторы  $\rho_2$ ,  $\rho_3$  и  $\rho_1$  будут тоже мнимыми. Тогда для оператора  $K$ , определяемого формулой (14.456), дираковский гамильтониан  $H$  будет инвариантным относительно обращения времени, т. е.

$$KH_D K^{-1} = H_D. \quad (14.50)$$

При включении в гамильтониан внешнего электромагнитного поля оператор обращения времени немного усложняется. Как нерелятивистский, так и дираковский гамильтонианы теряют свою инвариантность относительно обращения времени, как только мы вводим в них векторный потенциал, так как

$$(p - eA/c)^2 \rightarrow (p + eA/c)^2, \quad (14.51a)$$

$$\rho_1 [\sigma \cdot (p - eA/c)] \rightarrow \rho_1 [\sigma \cdot (p + eA/c)]. \quad (14.51b)$$

Инвариантность относительно преобразования отражения времени сохраняется, если внешнее магнитное поле создается физическими токами, так как при действии оператора отражения времени эти токи и, следовательно, магнитное поле меняют свои нап-

равления на обратные. Мы можем учесть эти изменения, вводя в рассмотрение оператор  $K_A$ :

$$K_A A K_A = -A. \quad (14.52a)$$

В случае когда магнитное поле создается токами, мы можем формально определить «полный оператор обращения времени»

$$K_{\text{полн}} = K_A K; \quad (14.52б)$$

тогда мы получим соотношение

$$K_{\text{полн}} H_D [K_{\text{полн}}]^{-1} = H_D, \quad (14.52в)$$

справедливое для дираковского гамильтониана  $H_D$  с учетом внешнего поля.

Если бы существовали элементарные магнитные «монополи», инвариантность относительно обращения времени (в том смысле, как она здесь определена) нарушалась бы (либо необходимо было бы считать, что элементарный электрический заряд или элементарный магнитный полюс нечетны при преобразовании обращения времени).

### § 9. Преобразование зарядового сопряжения

Рассмотрим временное уравнение Дирака при наличии внешнего электромагнитного поля

$$\{\rho_1 [\sigma \cdot (pc - eA)] + \rho_3 mc^2 + e\phi\} \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (14.53)$$

Оператор  $\rho_2$  надо определить таким образом, чтобы он антикоммутировал с операторами  $\rho_1$  и  $\rho_3$ . На левую и правую части уравнения Дирака (14.53) подействуем оператором

$$K_C = \rho_2 K = i\rho_2 \sigma_y K_0, \quad (14.54)$$

где  $K$  — оператор обращения времени (14.45б); в результате получим

$$\{\rho_1 [\sigma \cdot (pc + eA)] + \rho_3 mc^2 - e\phi\} K_C \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K_C \psi. \quad (14.55)$$

Состояние  $K_C \psi$ , таким образом, удовлетворяет уравнению Дирака для частицы, обладающей зарядом противоположного знака по сравнению с первоначальной частицей. Оператор  $K_C$  называют поэтому оператором «зарядового сопряжения».

Может показаться удивительным, что оператор столь простого вида [см. (14.54)] является оператором зарядового сопряжения для уравнения Дирака с внешним полем. Рассмотрим, например, случай, когда  $A = 0$  и  $\phi = -e/r$ , т. е. возьмем атом водорода. Оператор  $K_C$  осуществляет только простое комплексное сопряже-

ние и преобразование спиновых компонент волновой функции; он не изменяет распределения плотности вероятности найти частицу в конфигурационном пространстве. Интересно спросить: как оператор  $K_C$  может перевести волновую функцию электрона в атоме водорода в волновую функцию, описывающую движение *позитрона* в поле протона этого атома водорода? Ведь волновая функция позитрона должна описывать позитрон, *связанный* с протоном, с плотностью вероятности, имеющей максимум на протоне и экспоненциально убывающей на больших расстояниях. Постарайтесь осознать этот парадокс и пока не читайте дальше!

В нерелятивистской теории электрон и позитрон описываются различными волновыми функциями и различными гамильтонианами. Действительно, электрон притягивается положительно заряженным протоном, а позитрон отталкивается им. Очевидно, не существует такого решения нерелятивистского уравнения Шредингера для электрона в данном внешнем поле, которое можно было бы преобразовать *простым* образом в «связанное» решение для позитрона. В релятивистском случае простое преобразование (14.54) переводит решение электронного уравнения Дирака в решение позитронного уравнения Дирака.

Дело здесь в том, что установленное нами взаимно однозначное соответствие между «электронными» и «позитронными» состояниями — это еще не соответствие между состояниями физических электрона и позитрона. Действительно, имеются и такие решения дираковского электронного уравнения, которые соответствуют множеству состояний с отрицательной энергией, а последние не могут интерпретироваться как состояния физического электрона. Эти формальные решения можно интерпретировать, если только использовать дираковскую теорию дырок или квантовую теорию поля. Более аккуратное рассмотрение преобразования, осуществляемого оператором  $K_C$  [см. (14.54)], показывает, что для любой собственной функции  $\psi$  дираковского гамильтониана состояние  $K_C\psi$  действительно является собственной функцией гамильтониана с зарядом противоположного знака, но при этом собственное значение гамильтониана тоже, оказывается, имеет противоположный знак:

$$H_D(e)\psi = E\psi, \quad (14.56a)$$

$$H_D(-e)K_C\psi = -EK_C\psi. \quad (14.56b)$$

Преобразование  $K_C$  переводит решение *электронного* уравнения Дирака с *положительной энергией* в решение *позитронного* уравнения Дирака с *отрицательной энергией* и наоборот. Оно либо переводит физическое состояние электрона в формальное решение позитронного уравнения с отрицательной энергией, либо переводит формальное решение электронного уравнения с отрицатель-

ной энергией в такое решение позитронного уравнения, которое представляет физическое состояние позитрона. Всегда преобразование  $K_C$  осуществляется между формальным и физическим решениями уравнения Дирака; одно из них непосредственно интерпретируется как физическое состояние. Указанное преобразование поэтому качественно отличается от преобразований трансляций и поворотов, четности и обращения времени, которые рассматривались до сих пор. Преобразование  $K_C$  не переводит одно физическое состояние в другое. Электронное состояние с отрицательной энергией можно интерпретировать как описывающее физическое состояние позитрона; это в точности то состояние, которое получается при применении преобразования (14.54). Рассматриваемое преобразование есть, таким образом, преобразование, связывающее два различных описания одного и того же физического состояния, которому отвечают разные решения двух разных уравнений Дирака.

Связь с нерелятивистской теорией теперь проясняется. В нерелятивистском пределе состояния с положительными и отрицательными энергиями полностью разделены в уравнении Дирака. В результате возникают две не связанные теории: одна для электронов, а другая для позитронов. Обе эти теории оказываются частями единой теории только в релятивистской области, когда начинает сказываться рождение и уничтожение электрон-позитронных пар. Преобразование (14.53)—(14.56) просто показывает, что уравнение Дирака описывает и электроны, и позитроны; это преобразование не *выражает никакого принципа инвариантности*.

Мы можем, однако, рассмотреть *настоящее преобразование зарядового сопряжения*, которое переводит одно физическое состояние в другое физическое состояние системы. Допустим, что электрон и протон в атоме водорода преобразуются в позитрон и антипротон соответственно. Полученный таким образом «антиводородный атом» должен иметь свойства, очень сходные со свойствами атома водорода, так как электростатические и электромагнитные силы в нем идентичны с силами в атоме водорода. Теперь мы действительно имеем преобразование между разными физическими состояниями, которые описываются решениями одних и тех же динамических уравнений квантовой механики. Однако это преобразование не совпадает с преобразованием (14.55), при котором электрон рассматривается как движущийся в заданном внешнем поле ядра, никак не меняющемся при преобразовании. Если наша система является атомом водорода, то преобразование (14.55) переводит электрон в позитрон, а поле, в котором электрон движется, остается полем протона. Обе полученные системы, связанные этим преобразованием, физически совершенно различны, и между их собственными функциями нет взаимно однозначного соответствия: атом водорода имеет бесконечное множе-

ство связанных состояний, а позитрон-протонная система не имеет ни одного.

Формальное преобразование (14.53) — (14.56) можно немного видоизменить, чтобы получить из него «преобразование зарядового сопряжения», которое согласовывалось бы с только что описанной картиной. Воспользуемся приемом, аналогичным тому, который был развит выше, когда мы рассматривали преобразование обращения времени при наличии в гамильтониане внешнего магнитного поля. Если считать, что электромагнитные поля создаются электрическими зарядами, то полное преобразование зарядового сопряжения для всех частиц во вселенной должно изменять знаки электромагнитных потенциалов  $A$  и  $\phi$ . Тогда мы можем определить оператор полного зарядового сопряжения формулой

$$K_C^{\text{полн}} = K_E K_C, \quad (14.57)$$

где  $K_E$  — оператор зарядового сопряжения электромагнитного поля; он изменяет знаки электромагнитных потенциалов на обратные, т. е.

$$K_E A K_E = -A, \quad (14.58a)$$

$$K_E \phi K_E = -\phi. \quad (14.58b)$$

Следовательно,

$$K_C^{\text{полн}} H_D [K_C^{\text{полн}}]^{-1} = -H_D. \quad (14.59)$$

Таким образом, для любого состояния  $\psi$ , являющегося собственной функцией гамильтониана Дирака  $H_D$ , имеем

$$H_D \psi = E \psi, \quad (14.60a)$$

$$H_D K_C^{\text{полн}} \psi = -E K_C^{\text{полн}} \psi, \quad (14.60b)$$

т. е. полный оператор зарядового сопряжения преобразует любую собственную функцию гамильтониана  $H_D$  в другую его собственную функцию с противоположным по знаку собственным значением.

Обратите внимание на разницу между уравнениями (14.60) и сходными уравнениями (14.56). В оба уравнения (14.60) входит *один и тот же* гамильтониан, а потому обе фигурирующие в (14.60) собственные функции — это собственные функции одного и того же гамильтониана, описывающие разные физические состояния. В оба уравнения (14.56) входят *разные* гамильтонианы; обе собственные функции, входящие в (14.56), описывают одно и то же физическое состояние. В гамильтонианы уравнений (14.56) электромагнитные потенциалы входят как внешние параметры, не изменяющиеся при преобразовании зарядового сопряжения. В уравнениях (14.60) они выступают уже как физические пере-



менные, меняющие свой знак при операции зарядового сопряжения.

Предположим, что состояние  $\psi$  в (14.56а) и (14.60а) является основным состоянием атома водорода. Тогда состояние, входящее в (14.56б), будет состоянием *позитрона с отрицательной энергией*, движущегося в поле протона. Если это состояние рассматривать как «дырочное состояние», то это будет дырка в «море» нормально-заполненных *позитронных состояний* с отрицательной энергией, поскольку оно есть решение уравнения Дирака для позитронов. Рассматриваемое состояние описывает антипозитрон, т. е. отрицательный электрон, движущийся в поле протона в атоме водорода, находящемся в основном состоянии. С другой стороны, состояние, входящее в (14.60б), — это состояние *электрона с отрицательной энергией*, движущегося в поле электрического заряда противоположного знака по сравнению с полем протона, т. е. в поле, которое создавалось бы *антипротоном*. Если данное состояние рассматривать как «дырочное состояние», то это будет дырка в «море» отрицательных электронов, так как оно есть решение уравнения Дирака для электронов, а не для позитронов. Состояние описывает позитрон, движущийся в поле антипротона в «атоме антиводорода», находящемся в основном состоянии. Следовательно, состояние в (14.56б) — это в точности то самое состояние атома водорода, которое входит в (14.56а); состояние в (14.60б) — это *физическое* зарядово сопряженное состояние атома антиводорода.

Преобразования четности, отражения времени и зарядового сопряжения в релятивистской квантовой теории поля надо рассматривать все вместе. Исходя из очень общих соображений, можно доказать, что релятивистская теория поля должна быть обязательно инвариантной относительно *произведения* всех трех указанных преобразований. Это знаменитая «*CPT-теорема*». Совершенно не обязательно, чтобы теория была инвариантной относительно каждого из преобразований  $P$ ,  $C$  и  $T$ . Сильные же электромагнитные взаимодействия инвариантны относительно каждого из трех преобразований, но слабые взаимодействия, проявляющиеся, например, при ядерном  $\beta$ -распаде, как теперь известно, *не инвариантны ни относительно  $P$ , ни относительно  $C$ , а также не инвариантны и относительно преобразования  $PC$ .*

### Задачи

1. Рассмотрите *антиунитарный* оператор, удовлетворяющий условию  $K^4 = 1$ . Обсудите классификацию состояний квантовомеханической системы по собственным функциям этого оператора и классификацию операторов. Получите соотношения между матричными элементами собственных операторов, взятыми по соб-

ственным состояниям оператора  $K^4$ . Если гамильтониан системы коммутирует с оператором  $K$ , то что можно сказать о собственных функциях гамильтониана?

2. Пусть  $A$ ,  $B$  и  $C$  — три эрмитовых оператора, удовлетворяющих коммутационным соотношениям

$$[A, B] = -iC, \quad [C, A] = iB, \quad [B, C] = iA.$$

Заметьте, что эти коммутационные соотношения отличаются от обычных коммутационных соотношений для операторов момента количества движения знаком в правой части первого из них. Рассмотрите систему, гамильтониан которой  $H$  коммутирует с операторами  $A$  и  $B$ , т. е.

$$[H, A] = [H, B] = 0.$$

А. Если  $\psi$  — невырожденная собственная функция оператора  $H$ , то каким условиям должна удовлетворять функция  $\psi$ ?

Б. Покажите, что любая собственная функция гамильтониана  $H$ , которая не удовлетворяет условиям п. А, должна быть бесконечно кратно вырождена.

3. Пусть частица с электрическим зарядом  $e$  и массой  $m$  движется в области, заключенной между двумя коаксиальными цилиндрами радиусами  $R$  и  $R + \delta r$ . Пусть заданный магнитный поток пронизывает пространство внутри внутреннего цилиндра и направлен вдоль оси цилиндра, а в области, где движется частица, нет никакого магнитного поля. Эта ситуация описывается постоянным векторным потенциалом  $A$ , который везде направлен по касательной к поверхности цилиндров нормально к их оси, т. е. имеет только  $\theta$ -составляющую в цилиндрической системе координат.

А. Составьте выражение для гамильтониана этой квантово-механической системы в цилиндрической системе координат.

Б. Найдите волновую функцию основного состояния и энергию основного состояния при разных векторных потенциалах  $A$ . Найдите электрический ток, текущий по внутреннему цилиндру.

В. Поскольку на электрон не действует никакого магнитного поля, то при изменении величины величины векторного потенциала силы, действующие на частицу, не изменяются, но энергия основного состояния изменяется. Наблюдаемо ли это изменение энергии? Постарайтесь обосновать ваш ответ.

4. Рассмотрите многочастичную систему тождественных бозонов массы  $m$  и заряда  $e$ , движущихся между внутренним цилиндром радиусом  $R_1$  и коаксиальным с ним внешним цилиндром радиуса  $R_2$ . Пусть все эти бозоны находятся в основном состоянии, соответствующем заданному векторному потенциалу  $A(\mathbf{r})$ , кото-

рый по предположению направлен вдоль  $\theta$  и зависит только от  $r$ . Допустите, что волновая функция зависит только от  $\theta$ . Обозначьте число частиц в единице объема через  $n$  и предположите, что оно постоянно в области между цилиндрами.

А. Найдите энергию основного состояния и плотность электрического тока в области между цилиндрами как функцию  $r$ .

Б. Предположите, что внешнего магнитного поля нет и что все магнитное поле в области между цилиндрами создается конвективным током бозонов. Используйте уравнения Максвелла для определения векторного потенциала по плотности тока и постройте самосогласованное решение для задачи в случае, когда векторный потенциал  $A(r)$  создается самими бозонами.

В. К каким физическим явлениям можно приложить результаты п. Б?

5. Рассмотрите вращение несимметричного тела или многочастичной системы относительно центра масс (например, возьмите волчок, имеющий форму эллипсоида). Пусть  $V_1$ ,  $V_2$  и  $V_3$  — три ортогональных единичных вектора, жестко связанных с волчком (например, с направлениями его главных осей эллипсоида). Эти векторы могут служить, таким образом, динамическими переменными, значения которых, однако, зависят от выбора неподвижной системы координат, относительно которой наше тело вращается. Обозначьте через  $J$  полный момент количества движения системы.

А. Используя тот факт, что  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $V_3$  — векторы, выпишите коммутационные соотношения между тремя операторами полного момента количества движения  $J_x$ ,  $J_y$ ,  $J_z$  и тройками составляющих каждого из рассматриваемых векторов  $V_{1x}$ ,  $V_{1y}$ ,  $V_{1z}$ ,  $V_{2x}$ ,  $V_{2y}$ ,  $V_{2z}$ ,  $V_{3x}$ ,  $V_{3y}$ ,  $V_{3z}$ .

Б. Покажите, что составляющие момента количества движения на направления этих векторов, т. е. величины

$$J_1 = J \cdot V_1, \quad J_2 = J \cdot V_2, \quad J_3 = J \cdot V_3$$

коммутируют друг с другом и с операторами момента количества движения  $J_x$ ,  $J_y$  и  $J_z$ .

В. Покажите, что операторы  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$  удовлетворяют почти таким же коммутационным соотношениям, как операторы момента количества движения; нужно только изменить знак.

Г. Считайте операторы  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$  операторами инфинитезимальных поворотов. В чем различие между поворотами, порождаемыми этими операторами, и поворотами, порождаемыми операторами  $J_x$ ,  $J_y$ ,  $J_z$ . Почему операторы  $J_1$  и  $J_2$  коммутируют, хотя они и являются составляющими момента количества движения по разным направлениям? [Указание. Посмотрите, коммутируют ли операторы соответствующих поворотов.]

## Глава 15. ГРУППА ЛОРЕНЦА

### § 1. Инфинитезимальный оператор преобразования симметрии, явно зависящего от времени

Преобразования Лоренца — это преобразования симметрии, которые перепутывают пространственные и временную переменные. Прежде чем заняться их теорией, исследуем особые свойства инфинитезимального оператора любого преобразования симметрии, явно зависящего от времени. Пусть  $\Psi(t)$  — решение временного уравнения Шредингера

$$H\Psi(t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (15.1a)$$

написанного для квантовомеханической системы, характеризуемой гамильтонианом  $H$ . Пусть  $G$  обозначает инфинитезимальный оператор некоторого преобразования симметрии. Другими словами, пусть оператор  $G$  преобразует состояние  $\Psi(t)$ , удовлетворяющее уравнению (15.1a), в другое состояние, которое тоже является решением уравнения Шредингера (15.1a), т. е.

$$\begin{aligned} H(1 + ivG/\hbar)\Psi(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(1 + ivG/\hbar)\Psi = \\ &= -v \frac{\partial G}{\partial t} \Psi + i\hbar(1 + ivG/\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \end{aligned} \quad (15.1b)$$

где  $v$  — некоторая бесконечно малая постоянная, а  $\partial G/\partial t$  — частная производная по времени, от которого оператор  $G$  зависит явно. Умножая уравнение Шредингера (15.1a) слева на  $1 + ivG/\hbar$  и вычитая результат из (15.1b), получаем соотношение

$$[H, G]\Psi(t) = i\hbar \frac{\partial G}{\partial t} \Psi(t). \quad (15.2a)$$

Если это условие выполняется для любого состояния  $\Psi$ , то оператор  $G$  должен удовлетворять следующему операторному уравнению <sup>1)</sup>:

$$[H, G] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial t}; \quad (15.2b)$$

<sup>1)</sup> Более точно, условие (15.2a) должно иметь место при всех временах  $t$  для любых состояний  $\Psi(t)$ , являющихся решениями временного уравнения Шредингера (15.1a). Для таких состояний все производные по времени, действующие на  $\Psi(t)$  в (15.2a), можно исключить, используя уравнение (15.1a) и заменяя каждое  $\partial \Psi/\partial t$  на  $H\Psi/i\hbar$ . Далее условие (15.2a) имеет место при любом фиксированном времени  $t = t_1$  для любой полной системы не зависящих от времени функций  $\Psi(t_1)$ , поскольку из каждой такой функции можно построить решение временного уравнения Шредингера (15.1a). Таким образом, из (15.2a) мы действительно получаем уравнение (15.2b).

его можно также записать в виде

$$e^{i\alpha G} \left[ H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] e^{-i\alpha G} = H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (15.2в)$$

или в виде

$$\dot{G} \equiv \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [H, G] = 0, \quad (15.2г)$$

где  $\dot{G}$  означает полную производную по времени в гейзенберговском смысле.

Каждое из трех эквивалентных уравнений (15.2) выражает условие, которому должен удовлетворять оператор  $G$ , порождающий такие преобразования, которые при действии на решения временного уравнения Шредингера дают состояния, тоже являющиеся его решениями. Условие (15.2в) показывает, что *уравнение Шредингера инвариантно относительно преобразований, которые порождаются оператором  $G$* . Условие (15.2г) свидетельствует, что *полная временная производная оператора  $G$  равна нулю*, т. е. что оператор  $G$  есть интеграл движения даже в том случае, если он явно зависит от времени. Ниже в этой главе используется шредингеровское представление, в котором векторы состояний зависят от времени, а операторы не зависят (если только они не зависят явно от времени  $t$ , как от параметра).

Из уравнения (15.2б) следует, что оператор  $G$ , обладающий свойством (15.1б) и явно не зависящий от времени, должен коммутировать с гамильтонианом. Таким образом, мы приходим снова к случаю преобразований симметрии, не зависящих от времени (мы их рассматривали в гл. 14). Если оператор  $G$  явно зависит от времени, то из уравнения (15.2б) следует, что он не может коммутировать с  $H$ . Если  $\Psi$  — собственная функция гамильтониана  $H$ , то функция  $(1 + i\nu G/\hbar)\Psi$  *не может быть собственной функцией гамильтониана  $H$  с тем же самым собственным значением*. Зависящий от времени оператор  $G$ , удовлетворяющий уравнению (15.1), должен поэтому породить множество состояний, имеющих разные энергии, и дать нам определенную информацию о структуре спектра оператора  $H$ .

Случай линейной зависимости от времени особенно интересен, так как инфинитезимальные операторы преобразований Галилея и Лоренца имеют вид <sup>1)</sup>

$$G = \hbar J - Pt, \quad (15.3а)$$

<sup>1)</sup> В этом можно убедиться следующим образом:

1. В *нерелятивистской проблеме многих частиц* координаты частиц — динамические переменные, не зависящие явно от времени. При бесконечно малых преобразованиях Галилея и Лоренца координаты частиц оказываются линейными функциями времени. Поскольку время в этом случае выступает как параметр и не является само динамической переменной, то отсюда следует, что инфинитезимальные операторы этих преобразований должны быть

где  $J$  и  $P$  — не зависящие от времени эрмитовы операторы. Обычно считают, что  $\hbar = 1$ . Но мы не будем так поступать, чтобы можно было следить за размерностями физических величин. Поэтому в формулы вроде (15.3а) мы вводим явно постоянную Планка  $\hbar$ , и тогда сразу видно, что оператор  $G$  имеет размерность действия (или момента количества движения), величина  $J$  безразмерная, а  $P$  имеет размерность импульса. Подставляя (15.3а) в условие (15.2а), получаем

$$[H, G] = \hbar [H, J] - [H, P]t = -i\hbar P. \quad (15.3б)$$

Поскольку соотношение (15.3б) должно выполняться при всех значениях  $t$ , можно приравнять в нем постоянные члены, не зависящие от  $t$  и линейные по  $t$ , по отдельности. Таким образом, имеем

$$[H, P] = 0, \quad (15.4а)$$

$$[H, G] = \hbar [H, J] = -i\hbar P. \quad (15.4б)$$

Инвариантность уравнения движения (15.1) относительно преобразований, порождаемых оператором  $G$  (линейно зависящих от времени) по необходимости приводит к требованию, чтобы коэффициент, стоящий перед  $t$ , был оператором, коммутирующим с гамильтонианом. Например, пусть  $G$  — инфинитезимальный оператор преобразования Галилея или Лоренца в направлении  $x$ ; тогда оператор  $P$  будет пропорционален составляющей импульса в направлении  $x$ . *Сохранение импульса, таким образом, автоматически, вытекает из требования галилеевой или лоренцевой инвариантности а соответствующие преобразования трансляций должны входить в однородную группу Лоренца. Лоренцева инвариантность без трансляционной инвариантности невозможна.*

Чтобы продолжить наше рассмотрение, нам нужно теперь знать коммутационные соотношения между операторами  $J$  и  $P$ . Обозначим коммутатор этих операторов следующим образом:

$$\hbar [J, P] = [G, P] \equiv i\hbar C. \quad (15.5а)$$

В каждом конкретном случае, когда операторы  $J$  и  $P$  даны, оператор  $C$  легко вычислить. При этом всегда из (15.4) получаем

$$[H, C] = [[H, G], P] + [G, [H, P]] = 0. \quad (15.5б)$$

линейными функциями времени.

2. В релятивистской квантовой теории поля полная энергия и полный импульс являются интегралами движения и преобразуются как четыре-векторы при преобразованиях Лоренца. Коммутатор инфинитезимального оператора преобразований Лоренца с гамильтонианом, являющимся временной компонентой четыре-вектора, таким образом, оказывается линейной комбинацией остальных компонент этого четыре-вектора, каждая из которых не зависит от времени. Подставляя в уравнение (15.2б) этот коммутатор, видим, что инфинитезимальный оператор должен быть некоторой линейной функцией времени.

Таким образом,  $C$  — интеграл движения; он представляет собой либо совсем новый оператор, либо некоторую функцию операторов  $H$  и  $P$ . В практически интересных случаях преобразований Галилея и Лоренца оператор  $C$  коммутирует с оператором  $P$ . Поэтому ниже мы предполагаем, что

$$[C, P] = 0. \quad (15.5в)$$

Операторы  $H$ ,  $P$  и  $C$ , следовательно, можно одновременно диагонализировать и построить базис их одновременных собственных функций

$$H | E', P', C', \alpha' \rangle = E' | E', P', C', \alpha' \rangle, \quad (15.6а)$$

$$P | E', P', C', \alpha' \rangle = P' | E', P', C', \alpha' \rangle, \quad (15.6б)$$

$$C | E', P', C', \alpha' \rangle = C' | E', P', C', \alpha' \rangle. \quad (15.6в)$$

Здесь  $\alpha'$  — собственные значения остальных операторов, которые коммутируют с оператором  $G$  и которые необходимо учитывать, чтобы иметь квантовые числа, однозначно характеризующие состояния системы.

Поддействуем теперь оператором бесконечно малого преобразования (15.1б) на данные состояния. С точностью до членов первого порядка по  $v$  имеем

$$\begin{aligned} H (1 + ivG/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle &= \\ &= [(1 + ivG/\hbar) H + iv [H, G]/\hbar] | E', P', C', \alpha' \rangle = \\ &= (1 + ivG/\hbar) (H + iv [H, G]/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle, \end{aligned} \quad (15.7а)$$

где мы упростили получающееся выражение, добавив к нему член второго порядка по  $v$ , чтобы можно было выделить множитель  $(1 + ivG/\hbar)$ . Аналогично получаем

$$\begin{aligned} P (1 + ivG/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle &= \\ &= (1 + ivG/\hbar) (P + iv [P, G]/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle. \end{aligned} \quad (15.7б)$$

Используя (15.4) и (15.5), из (15.7а) и (15.7б) находим

$$\begin{aligned} H (1 + ivG/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle &= \\ &= (1 + ivG/\hbar) (E' + vP') | E', P', C', \alpha' \rangle, \end{aligned} \quad (15.8а)$$

$$\begin{aligned} P (1 + ivG/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle &= \\ &= (1 + ivG/\hbar) (P' + vG') | E', P', C', \alpha' \rangle. \end{aligned} \quad (15.8б)$$

Таким образом, состояния  $(1 + ivG/\hbar) | E', P', C', \alpha' \rangle$  являются одновременными собственными функциями операторов  $H$  и  $P$  с собственными значениями, отличающимися от  $E'$  и  $P'$  слагаемыми, пропорциональными бесконечно малому параметру  $v$ , пробегающему непрерывный ряд значений. Бесконечно малое преоб-

разование (15.7), следовательно, порождает непрерывный набор одновременных собственных функций операторов  $H$  и  $P$ . Вычисленные в (15.8) изменения собственных значений можно выразить также следующими дифференциальными уравнениями:

$$\frac{\partial E'}{\partial v} = P', \quad (15.9a)$$

$$\frac{\partial P'}{\partial v} = C'. \quad (15.9б)$$

Перемножая крест-накрест уравнения (15.9a) и (15.9б), получаем

$$P' \frac{\partial P'}{\partial v} = C' \frac{\partial E'}{\partial v}. \quad (15.9в)$$

До сих пор мы не конкретизировали вид коммутатора  $[C, J]$ . В обоих случаях, представляющих непосредственный физический интерес, т. е. для галилеевых и лоренцевых преобразований, оператор  $C$  оказывается равным соответственно  $c$ -числу и оператору, пропорциональному гамильтониану  $H$ . Ниже мы рассмотрим оба случая подробно, выписывая все значения коэффициентов пропорциональности, чтобы придать формулам обычный вид.

*Случай 1:*  $C = C' = M$ . Мы можем решить дифференциальные уравнения (15.9a) и (15.9б) и найти

$$P' = M(v - v_0), \quad (15.10a)$$

$$E' = \frac{1}{2} M(v - v_0)^2 + E_0; \quad (15.10б)$$

здесь  $v_0$  и  $E_0$  — постоянные интегрирования. Следовательно,

$$E' = E_0 + P'^2/2M. \quad (15.10в)$$

Мы получили обычное *нерелятивистское* соотношение между энергией, скоростью и импульсом частицы.

*Случай 2:*  $C = H/c^2$ ,  $C' = E'/c^2$ . Для этого случая из уравнения (15.9в) находим

$$P'^2 + M^2c^2 = E'/c^2, \quad (15.11)$$

где  $M^2c^2$  — постоянная интегрирования. Мы получаем в точности известное *релятивистское* соотношение между энергией и импульсом частицы.

Итак, из факта существования оператора  $G$ , линейно зависящего от времени и удовлетворяющего коммутационному соотношению (15.2б), следует, что оператор  $P$  коммутирует с гамильтонианом, что спектры собственных значений обоих операторов  $H$  и  $P$  непрерывны и что существует «непрерывный мультиплет» состояний, получаемых друг из друга преобразованиями симметрии, порождаемыми оператором  $G$ . Собственные значения операторов  $H$  и  $P$



для состояний этого «непрерывного мультиплетта» связаны друг с другом соотношениями, которые вытекают непосредственно из свойств алгебры, порожденной коммутаторами операторов  $H$ ,  $J$  и  $P$ ; при этом получаются соотношения между энергией, импульсом и скоростью, характерные для преобразований Галилея и Лоренца.

## § 2. $G$ -спин. Преобразования группы Лоренца $2+1$ измерений

Рассмотрим теперь преобразования Лоренца в  $2 + 1$ -мерном пространстве-времени, т. е. преобразования Лоренца в направлениях  $x$  и  $y$  и преобразования поворотов плоскости  $xy$ . Они порождаются некоторыми зависящими от времени квазиспиновыми операторами и оставляют уравнение Шредингера инвариантным, т. е. квазиспиновые инфинитезимальные операторы удовлетворяют уравнению (15.26). Таким образом, мы рассмотрим три оператора  $G_{12}$ ,  $G_{20}$  и  $G_{01}$ , которые удовлетворяют коммутационным соотношениям для операторов момента количества движения:

$$[G_{12}, G_{20}] = i\hbar G_{01}, \quad (15.12a)$$

$$[G_{20}, G_{01}] = i\hbar G_{12}, \quad (15.12b)$$

$$[G_{01}, G_{12}] = i\hbar G_{20}. \quad (15.12c)$$

Индексы 1 и 2 относятся к пространственным переменным, а индекс 0 — к временной. Для удобства мы взяли в (15.12) такие же знаки в коммутаторах, как и в алгебре операторов обычного момента количества движения, т. е. для группы операторов поворотов в обычном, трехмерном пространстве с положительно определенной метрикой. Приведенное рассмотрение можно приложить, однако, и к случаю неевклидовой метрики, когда операторы  $G_{20}$  и  $G_{01}$  являются антиэрмитовыми операторами; тогда эрмитовыми лоренцевыми инфинитезимальными операторами будут операторы  $G_{20}$  и  $G_{01}$ .

Оба наших лоренцевых инфинитезимальных оператора линейно зависят от времени, а наш инфинитезимальный оператор поворотов в плоскости 12, напротив, от времени не зависит, так что

$$G_{12} = \hbar J_{12}, \quad (15.13a)$$

$$iG_{20} = \hbar J_{20} + P_2 t, \quad (15.13b)$$

$$iG_{01} = \hbar J_{01} - P_1 t. \quad (15.13c)$$

Знаки фазовых множителей в (15.13b) и (15.13c) выбраны так, чтобы наши обозначения можно было обобщить на случай четырехмерной группы Лоренца, которой мы займемся ниже в этой главе, и чтобы сделать все операторы  $J_{ij}$  и  $P_i$  эрмитовыми.

Поскольку коммутационные соотношения (15.12) совпадают по виду с коммутационными соотношениями для операторов обычного момента количества движения, то с операторами, входящими в них и называемыми *операторами G-спина*, можно поступать обычным образом, и это позволяет получить для них все результаты, которые следуют из коммутационных соотношений для операторов момента количества движения. Но так как теперь у нас операторы неэрмитовы, мы должны проявить известную осторожность и пользоваться только такими результатами обычной теории момента количества движения, которые получаются из коммутационных соотношений *без применения свойства эрмитовости операторов*. Рассмотрим, таким образом, операторы

$$G^2 = G_{12}^2 + G_{20}^2 + G_{01}^2, \quad (15.14a)$$

$$G_+ = G_{20} + iG_{01} = \hbar (J_{01} - iJ_{20}) - (P_1 + iP_2), \quad (15.14б)$$

$$G_- = G_{20} - iG_{01} = -\hbar (J_{01} + iJ_{20}) + (P_1 - iP_2), \quad (15.14в)$$

$$G_0 = G_{12} = \hbar J_{12}. \quad (15.14г)$$

Все линейные операторы можно расклассифицировать согласно их свойствам по отношению к преобразованиям в «G-спиновом пространстве». Для этого надо найти в явном виде коммутационные соотношения их с операторами G-спина (15.14).

Коммутационные соотношения гамильтониана  $H$  с операторами G-спина можно получить, зная, что уравнение Шредингера инвариантно при преобразованиях G-спина. Для каждого из операторов G-спина справедливы соотношения (15.3) и (15.4), т. е. мы имеем

$$[H, P_2] = [H, P_1] = [H, G_{12}] = [H, J_{12}] = 0, \quad (15.15a)$$

$$i[H, G_{20}] = \hbar [H, J_{20}] = i\hbar P_2, \quad (15.15б)$$

$$i[H, G_{01}] = \hbar [H, J_{01}] = -i\hbar P_1. \quad (15.15в)$$

Из (15.14) и (15.15) непосредственно получаем

$$[G_+, H] = i\hbar (P_1 + iP_2), \quad (15.16a)$$

$$[G_-, H] = -i\hbar (P_1 - iP_2), \quad (15.16б)$$

$$[G_0, H] = 0. \quad (15.16в)$$

Из этих коммутационных соотношений видно, что гамильтониан  $H$  не является «G-спиновым скаляром». Он в действительности является нулевой составляющей «G-спинового вектора». Как следует из соотношений (15.16a) и (15.16б), остальные компоненты этого G-спинового вектора пропорциональны  $P_1$  и  $P_2$ . Таким образом, мы имеем как раз вектор энергии-импульса для рассматриваемого случая группы Лоренца  $2 + 1$  измерений.

Построим все три составляющие этого  $G$ -спинового вектора с правильными фазовыми множителями, непосредственно получающимися из коммутационных соотношений (15.16а) и (15.16б):

$$V_0 = H, \quad (15.17а)$$

$$V_1 = -iP_1, \quad (15.17б)$$

$$V_2 = -iP_2. \quad (15.17в)$$

Коммутационные соотношения между операторами  $J$  и  $P$  сразу можно найти из коммутационных соотношений (15.12), если в них подставить выражения (15.13) для операторов  $G_{12}$ ,  $G_{20}$ ,  $G_{01}$  и приравнять в правых и левых частях коэффициенты не зависящие от  $t$  и линейные по  $t$ . Это дает

$$[J_{12}, J_{20}] = iJ_{01}, \quad [J_{12}, J_{01}] = -iJ_{20}, \quad (15.18а)$$

$$[J_{20}, J_{01}] = -iJ_{12}, \quad (15.18б)$$

$$[J_{12}, P_2] = -iP_1, \quad [J_{12}, P_1] = iP_2, \quad (15.18в)$$

$$[P_1, P_2] = 0. \quad (15.18г)$$

$$-\hbar [J_{20}, P_1] = \hbar [J_{01}, P_2] = -i [G_{20}, P_1] = i [G_{01}, P_2]. \quad (15.18д)$$

Как видим, три оператора  $J_{12}$ ,  $J_{20}$ ,  $J_{01}$  удовлетворяют почти в точности коммутационным соотношениям для операторов безразмерного момента количества движения, только знак в (15.18б) не такой, как в этих соотношениях. Это различие в знаке связано с тем, что мы имеем дело с неевклидовой метрикой, а не с обычной положительной метрикой. Воспользовавшись соотношениями (15.5), вычислим, чему равны коммутаторы между операторами  $G$  и  $P$ . Их мы найдем, потребовав, чтобы операторы  $H$ ,  $P_1$ ,  $P_2$  были составляющими вектора, а именно *вектора энергии-импульса*, а не составляющими тензора более высокого ранга. Тогда мы имеем

$$[G_+, P_1 + iP_2] \equiv 0, \quad (15.19а)$$

$$[G_-, P_1 - iP_2] \equiv 0, \quad (15.19б)$$

$$i [G_+, P_1 - iP_2] = i [G_-, P_1 + iP_2] = 2\hbar H. \quad (15.19в)$$

Из (15.15а) и (15.19в) видим, что для инвариантности уравнения Шредингера относительно преобразований симметрии, порождаемых зависящими от времени операторами (15.18), надо потребовать, чтобы существовали два таких оператора  $P_1$  и  $P_2$ , которые коммутировали бы друг с другом и с гамильтонианом. Это как раз составляющие импульса по направлениям 1 и 2, которые порождают соответствующие трансляции. Таким образом, абелева группа трансляций очень тесно связана с любой зависящей от времени алгеброй Ли. Можно было бы подумать, что очень полезно отыскать одновременные собственные функции операторов  $G^2$  и

$G_{12}$  (если непосредственно исходить из аналогии с теорией обычного момента количества движения). Но это было бы поспешное заключение, потому что оператор  $G^2$  не коммутирует с гамильтонианом:

$$[H, G^2] = \hbar (-P_1 G_{01} - G_{01} P_1 + G_{20} P_2 + P_2 G_{20}) \neq 0, \quad (15.20)$$

Следовательно, операторы  $H$  и  $G^2$  нельзя одновременно диагонализировать, а потому собственные функции оператора  $G^2$  не имеют простого физического смысла. *G-спиновые мультиплеты нельзя, таким образом, использовать для классификации собственных функций гамильтониана  $H$ .* Именно по этой причине мультиплеты, или неприводимые представления *однородной* группы Лоренца, никогда не используют для классификации состояний элементарных частиц или других квантовомеханических систем. Всегда мы должны учитывать наличие трансляций и рассматривать *неоднородную* группу Лоренца, которую называют также *группой Пуанкаре*. Мы должны изучать одновременные собственные функции операторов  $H$ ,  $P_1$ ,  $P_2$ , т. е. мультиплеты, порождаемые «неоднородной алгеброй», которая включает в себя инфинитезимальные операторы трансляций  $P_1$  и  $P_2$  наряду с инфинитезимальными операторами (15.12) «однородной» алгебры.

Можно построить два новых  $G$ -спиновых скаляра, беря скалярные произведения вектора  $V$  с самим собой и с генераторами спина, т. е.

$$V^2 = V_0^2 + V_1^2 + V_2^2 = H^2 - (P_1^2 + P_2^2), \quad (15.21a)$$

$$(G \cdot V) = G_{12} V_0 + G_{20} V_1 + G_{01} V_2 = G_{12} H - i(G_{20} P_1 + G_{01} P_2). \quad (15.21b)$$

Из коммутационных соотношений (15.15) непосредственно следует, что скаляры (15.21) коммутируют как с гамильтонианом  $H$ , так и с операторами  $P_1$  и  $P_2$ , т. е.

$$[H, V^2] = [H, (G \cdot V)] = 0 = [P_i, V^2] = [P_i, (G \cdot V)]. \quad (15.21в)$$

### § 3. Структура неоднородных $G$ -спиновых мультиплетов

Рассмотрим теперь подробнее структуру мультиплетов, имеющих в «неоднородной»  $G$ -спиновой алгебре, которая включает в себя также и инфинитезимальные операторы трансляций  $P_1$  и  $P_2$ . Каждый такой мультиплет состоит из одновременных собственных функций операторов  $H$ ,  $P_1$ ,  $P_2$ , которые можно получить из одной заданной собственной функции, действуя на нее  $G$ -спиновыми преобразованиями. Операторы  $V^2$  и  $(G \cdot V)$  можно диагонализировать одновременно с операторами  $H$ ,  $P_1$ ,  $P_2$ ; они инвариантны относительно « $G$ -спиновых поворотов». Собственные значения операторов  $V^2$  и  $(G \cdot V)$  будут одними и теми же для состояний отдель-

ных мультиплетов, и их поэтому можно использовать для характеристики отдельных мультиплетов (в точности так же, как собственные значения  $J^2$  используют для характеристики мультиплетов алгебры момента количества движения).

Чтобы найти собственные значения операторов  $V^2$  и  $(G \cdot V)$  для данного мультиплета, которые одинаковы для всех его состояний, мы должны взять какое-нибудь удобное для нас состояние этого мультиплета. Самым удобным состоянием будет состояние, когда собственные значения операторов  $P_1$  и  $P_2$  равны нулю. Это «состояние покоя» всегда существует, поскольку операторы  $P_1$  и  $P_2$ , как было показано выше, имеют неограниченные непрерывные спектры собственных значений. Для данного состояния

$$V^2 = H^2, \quad \text{если } P_1 = P_2 = 0. \quad (15.22a)$$

$$(G \cdot V) = G_{12}H = \hbar J_{12}H, \quad \text{если } P_1 = P_2 = 0. \quad (15.22b)$$

Физический смысл рассматриваемых мультиплетов и собственных значений (15.22) очень легко понять. Состояние  $P_1 = P_2 = 0$  соответствует системе отсчета, в которой наша система покоится. Собственное значение оператора  $V^2$  равно квадрату энергии состояния с нулевым импульсом, т. е. квадрату энергии покоя, или квадрату массы покоя. Обозначим это собственное значение через  $M^2$ . Оператор  $G_{12}$  — оператор момента количества движения для поворотов в плоскости 12. Его собственное значение для покоящегося состояния с нулевым импульсом — это значение момента количества движения в системе покоя (обычно его называют «внутренним спином» состояния). Собственное значение оператора  $(G \cdot V)$ , которое мы обозначим через  $MS\hbar$ , — произведение массы и спина рассматриваемого состояния покоя.

Состояния отдельных мультиплетов классифицируются с помощью собственных значений операторов  $V^2$ ,  $(G \cdot V)$ ,  $P_1$ ,  $P_2$ . Будем обозначать каждое такое состояние, как обычно, т. е.  $|M, S, P_1, P_2\rangle$ . Собственные значения операторов  $V^2$  и  $(G \cdot V)$  одни и те же для всех состояний данного мультиплета; они однозначно выражаются через массу и спин, одинаковые для всех состояний мультиплета. Ради простоты мы пользуемся квантовыми числами  $M, S$  вместо собственных значений  $M^2, MS\hbar$ . [В точности так же в теории обычного углового момента количества движения используется квантовое число  $j$  вместо собственного значения  $j(j+1)$ .] Собственные значения операторов  $P_1$  и  $P_2$  характеризуют индивидуальные состояния мультиплетов. [Они подобны магнитному квантовому числу для мультиплетов в теории обычного момента количества движения.] Таким образом, каждый рассматриваемый мультиплет состоит из покоящегося состояния с нулевым импульсом с определенными значениями массы и спина

и всех состояний с ненулевым импульсом, получаемых путем «придания» состоянию покоя произвольных значений  $P_1$  и  $P_2$ .

Неоднородные  $G$ -спиновые мультиплеты можно рассматривать как обобщения мультиплетов из теории обычного момента количества движения с тем только различием, что теперь мультиплет в целом характеризуется двумя квантовыми числами  $M$ ,  $S$ , а не одним  $j$ . Кроме того, каждое состояние в неоднородном  $G$ -спиновом мультиплете характеризуется двумя квантовыми числами  $P_1$  и  $P_2$ , а не одним  $M$ . Далее,  $P_1$  и  $P_2$  пробегают неограниченные непрерывные спектры собственных значений.

Состояния с ненулевым импульсом можно построить из состояния покоя, действуя на него соответствующими унитарными операторами, т. е.

$$e^{\alpha(G_{01} \cos \theta - G_{20} \sin \theta)} |M, S, 0, 0\rangle = \\ = |M, S, M \cos \theta \operatorname{sh} \alpha \hbar, M \sin \theta \operatorname{sh} \alpha \hbar\rangle. \quad (15.23)$$

Здесь выражения для собственных значений операторов  $P_1$  и  $P_2$  в зависимости от параметров  $\alpha$  и  $\theta$  данного унитарного преобразования получены только на основе коммутационных соотношений (15.15).

Пользуясь формулой (15.23), мы можем построить все состояния неоднородного  $G$ -спинового мультиплета, характеризуемого данными собственными значениями операторов  $V^2$  и  $(G \cdot V)$  (или, что то же самое, обозначаемого квантовыми числами  $M$  и  $S$ ). Матричные элементы любого из  $G$ -спиновых операторов, взятые между двумя произвольными состояниями данного неоднородного  $G$ -спинового мультиплета, можно найти, проводя простые алгебраические вычисления с использованием коммутационных соотношений рассматриваемой алгебры. Набор всех этих матричных элементов задает *представление алгебры*, т. е. задает набор матриц, удовлетворяющих определенным коммутационным соотношениям. Поскольку оператор  $G^2$  не диагонален для состояний неоднородных  $G$ -спиновых мультиплетов и они не характеризуются определенными значениями  $G^2$ , то наш неоднородный  $G$ -спиновый мультиплет содержит в себе много обычных  $G$ -спиновых мультиплетов, т. е. это — *приводимое* представление однородной алгебры (15.12). Вместе с тем неоднородный  $G$ -спиновый мультиплет задает *неприводимое представление* неоднородной алгебры (включающей также и операторы импульсов  $P_1$  и  $P_2$ ), и его нельзя разбить на меньшие по размеру мультиплеты этой алгебры. Каждый набор собственных значений операторов  $P_1$  и  $P_2$  появляется только по одному разу, и все состояния со всевозможными  $P_1$ ,  $P_2$  должны принадлежать одному и тому же мультиплету, поскольку любую пару собственных значений этих операторов можно преобразовать в любую другую пару некоторым  $G$ -спиновым преобразованием.

Для рассматриваемой упрощенной группы Лоренца  $2 + 1$  измерений имеется только один оператор момента количества движения и только одно состояние в заданном мультиплете с данным значением вектора импульса. Для четырехмерной группы Лоренца существуют три независимых оператора момента количества движения, и мультиплеты будут иметь по нескольку состояний, имеющих одинаковые собственные значения всех импульсов; эти состояния будут отличаться друг от друга ориентацией спина. В рассматриваемой сейчас простой группе Лоренца  $2 + 1$  измерений оператор «поворота спина» является как раз оператор  $(\mathbf{G} \cdot \mathbf{V})/M$ , действие которого сводится к действию оператора  $G_{12}$ , когда система покоится. Этот оператор порождает тривиальную группу преобразований, составленную из операций умножения каждого собственного состояния момента количества движения на некоторый множитель по модулю, равный 1. Она является аналогом в случае полной группы Лоренца так называемой «малой группы» преобразований, которые оставляют импульс состояния инвариантным.

Состояния внутри данного мультиплетета можно также характеризовать собственными значениями оператора  $G_{12}$  и оператора  $P^2 = P_1^2 + P_2^2$ . Это просто соответствует переходу от декартовых координат (плоских волн) к двумерным полярным координатам (цилиндрическим волнам). Собственные значения оператора  $P^2$  непрерывны. Собственные же значения оператора  $G_{12} = \hbar J_{12}$ , которые мы обозначаем  $J\hbar$ , дискретны. Последнее следует из того, что все указанные состояния можно получить, действуя на состояние покоя определенными комбинациями  $G$ -спиновых операторов, а эти комбинации могут изменить собственное значение  $J_{12}$  только на целое число. До сих пор мы не требовали, чтобы собственные значения спина были целыми или полуделыми, так что в принципе возможен и непрерывный спектр собственных значений спина. Однако если мы возьмем мультиплет с определенным значением спина, то допустимые для него значения полного момента количества движения могут отличаться от этого значения спина только на целое число.

«Цилиндрические» собственные состояния можно построить непосредственно из «декартовых» состояний (15.23). Прежде всего посмотрим, как ведут себя при конечных поворотах плоскости 12 состояния (15.23); при этом вспомним, что состояние с нулевым импульсом является собственной функцией оператора  $J_{12}$  с собственным значением  $S$ . Ради удобства мы будем пользоваться безразмерным оператором  $J_{12}$  вместо оператора  $G_{12}$ . Имеем

$$\begin{aligned}
 e^{-i\beta J_{12}} |M, S, M \cos \theta \operatorname{sh} \alpha \hbar, M \sin \theta \operatorname{sh} \alpha \hbar\rangle = \\
 = e^{-i\beta J_{12}} e^{\alpha (G_{01} \cos \theta - G_{20} \sin \theta)} e^{+i\beta J_{12}} e^{-i\beta J_{12}} |M, S, 0, 0\rangle = \\
 = e^{\alpha (G_{01} \cos (\theta + \beta) - G_{20} \sin (\theta + \beta))} e^{-i\beta S} |M, S, 0, 0\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{15.24}$$

Оператор поворота, таким образом, разделяется на «орбитальную» компоненту, которая поворачивает импульс, и «спиновую» компоненту, которая поворачивает спин. Теперь мы легко можем построить собственные функции момента количества движения:

$$|M, S, P, J\rangle = N \int_0^{2\pi} d\theta e^{iL\theta} |M, S, P_1 = P \cos \theta, P_2 = P \sin \theta\rangle, \quad (15.25)$$

где  $N$  — нормированный множитель. Полный момент количества движения  $J$  для состояния (15.25) есть сумма орбитального  $L$  и спинowego  $S$  моментов количества движения, как это легко видеть, действуя на состояние (15.25) оператором  $J_{12}$ , что дает

$$J_{12} |M, S, P, J\rangle = (L + S) |M, S, P, J\rangle. \quad (15.26)$$

Таким образом,

$$J = L + S. \quad (15.27)$$

Это совершенно четкое разделение орбитального и спинowego моментов количества движения может показаться удивительным всякому, кто знаком с теорией уравнения Дирака. Чтобы его пояснить, рассмотрим действие преобразования Лоренца (некоторого  $G$ -спинowego преобразования, порождаемого операторами  $G_{01}$  и  $G_{20}$ ) на состояние (15.23). Ради простоты положим, что  $\theta = 0$  и параметр  $\alpha$  — малая величина, и рассмотрим, бесконечно малое преобразование, порождаемое оператором  $G_{20}$ . Для него получим

$$e^{\gamma G_{20}} |M, S, M\alpha / \hbar, 0\rangle = e^{\gamma G_{20}} e^{\alpha G_{01}} |M, S, 0, 0\rangle. \quad (15.28)$$

Разлагая в правой части экспоненты и оставляя в разложениях только члены до второго порядка малости по  $\gamma$  и  $\alpha$  включительно, получаем

$$\begin{aligned} e^{\gamma G_{20}} e^{\alpha G_{01}} &\approx \left(1 + \gamma G_{20} + \frac{1}{2} \gamma^2 G_{20}^2\right) \left(1 + \alpha G_{01} + \frac{1}{2} \alpha^2 G_{01}^2\right) \approx \\ &\approx 1 + (\gamma G_{20} + \alpha G_{01}) + \frac{1}{2} (\gamma G_{20} + \alpha G_{01})^2 + \frac{1}{2} \gamma \alpha [G_{20}, G_{01}] \approx \\ &\approx e^{(\gamma G_{20} + \alpha G_{01})} e^{\frac{1}{2} \gamma \alpha \hbar G_{12}}. \end{aligned} \quad (15.29)$$

Второй множитель в правой части (15.29) осуществляет поворот спина, когда он действует на состояние с нулевым импульсом. Угол этого поворота зависит от значений обоих параметров  $\gamma$  и  $\alpha$ . Подставляя (15.29) в (15.28), получаем

$$e^{\gamma G_{20}} |M, S, M\alpha \hbar, 0\rangle \approx e^{\frac{1}{2} i \gamma \alpha \hbar S} |M, S, M\alpha \hbar, M\gamma \hbar\rangle. \quad (15.30)$$

Таким образом, при действии преобразования Лоренца на состояние (15.25) получаем не только ожидаемое преобразование импуль-



са, но также и поворот спина на угол, который зависит от значений обоих параметров преобразования Лоренца и от импульса состояния, на которое мы действуем рассматриваемым преобразованием. Следовательно, при повороте состояния (15.25) переменные импульса и спина точно разделяются, а при действии преобразования Лоренца они «хитрым» образом перепутываются. Совсем не так обстоит дело с уравнением Дирака: при действии преобразования Лоренца пространственные и спиновые переменные точно разделяются, а при повороте они перепутываются. Мы еще вернемся к этому вопросу после того, как обобщим все результаты, полученные в данном параграфе, на полную группу Лоренца  $3 + 1$  измерений.

#### § 4. Представления полной группы Лоренца

Рассмотрим теперь полную группу Лоренца в четырехмерном пространстве-времени. Прежде всего мы изучим алгебру инфинитезимальных операторов, порождающих повороты в евклидовом четырехмерном пространстве с положительно определенной метрикой. Обозначим отдельные координаты в пространстве-времени индексами 0, 1, 2, 3. Всего имеется шесть инфинитезимальных операторов, соответствующих поворотам во всех возможных координатных плоскостях, определяемых парами координатных осей. Удобно сгруппировать эти операторы следующим образом:

$$G_{12}, G_{23}, G_{31}, \quad (15.31a)$$

$$G_{03}, G_{01}, G_{02}. \quad (15.31b)$$

Повороты в плоскости  $\mu\nu$  характеризуются оператором, который мы записываем как  $G_{\mu\nu}$  или  $G_{\nu\mu}$ . Поскольку оба эти оператора характеризуют повороты по и против часовой стрелки, то мы должны их считать антисимметричными по перестановкам обоих индексов, т. е.

$$G_{\mu\nu} = -G_{\nu\mu}. \quad (15.32a)$$

Коммутационные соотношения для операторов (15.31) легко найти, поскольку эти операторы в любом трехмерном подпространстве пространства-времени удовлетворяют коммутационным соотношениям для операторов момента количества движения. Имеем

$$[G_{\mu\nu}, G_{\nu\rho}] = i\hbar G_{\rho\mu}. \quad (15.32b)$$

Операторы поворотов в двух независимых плоскостях (не имеющих ни одного одинакового индекса) должны коммутировать, т. е.

$$[G_{\mu\nu}, G_{\rho\sigma}] = 0, \text{ если } \rho \neq \mu, \rho \neq \nu, \sigma \neq \mu, \sigma \neq \nu. \quad (15.32в)$$

Формулы (15.32b) и (15.32в) представляют собой все необходимые коммутационные соотношения.

Три инфинитезимальных оператора (15.31а) — это три оператора момента количества движения в трехмерном подпространстве, характеризуемом индексами 1, 2, 3; три инфинитезимальные оператора (15.31б) можно рассматривать как три компоненты некоторого вектора в этом подпространстве, поскольку они удовлетворяют в точности тем же коммутационным соотношениям с операторами (15.31а), как и компоненты любого векторного оператора.

Удобно рассматривать суммы и разности соответствующих операторов из наборов (15.31а) и (15.31б), т. е. операторы

$$G_{ij}^1 = \frac{1}{2} [G_{ij} + \varepsilon_{ijk} G_{0k}] \quad (i = 1, 2, 3), \quad (15.33a)$$

$$G_{ij}^2 = \frac{1}{2} [G_{ij} - \varepsilon_{ijk} G_{0k}] \quad (i = 1, 2, 3). \quad (15.33б)$$

Как легко видеть, каждый из наборов операторов  $G_{ij}^1$  и  $G_{ij}^2$  в отдельности удовлетворяет коммутационным соотношениям для операторов момента количества движения, а операторы, принадлежащие разным наборам, коммутируют между собой:

$$[G_{ij}^\alpha, G_{jk}^\alpha] = i\hbar G_{ki}^\alpha \quad (\alpha = 1, 2), \quad (15.34a)$$

$$[G_{ij}^1, G_{rs}^2] = 0 \quad \text{для всех } i, j, r, s. \quad (15.34б)$$

Операторы (15.33а) и (15.33б) ведут себя, таким образом, как операторы двух независимых моментов количества движения, причем сумма этих операторов дает операторы полного момента количества движения в подпространстве 1, 2, 3, т. е.

$$G_{ij}^1 + G_{ij}^2 = G_{ij}. \quad (15.35)$$

Поэтому мы можем рассмотреть квадраты двух моментов количества движения:

$$(G^\alpha)^2 = (G_{12}^\alpha)^2 + (G_{23}^\alpha)^2 + (G_{31}^\alpha)^2 \quad (\alpha = 1, 2). \quad (15.36a)$$

Каждый из двух последних операторов коммутирует с каждым из операторов (15.33), а следовательно, с каждым из операторов (15.31), т. е.

$$[(G^\alpha)^2, G_{ij}^\beta] = 0 = [(G^\alpha)^2, G_{\mu\nu}]; \quad (15.36б)$$

здесь мы присоединяемся к общепринятому соглашению и обозначаем греческими буквами индексы при операторах  $G$ , которые пробегают значения 0, 1, 2, 3, и латинскими — индексы, которые пробегают только значения 1, 2, 3.

Итак, мы видим, что отдельные мультиплеты и состояния в них (или неприводимые представления) для четырехмерной группы вращений можно характеризовать квантовыми числами  $G^1, G^2$ ,

$M^1$ ,  $M^2$  двух независимых моментов количества движения. Отдельный мультиплет характеризуется двумя числами  $G^1$  и  $G^2$  и содержит  $(2G^1 + 1)(2G^2 + 1)$  состояний. Состояния, принадлежащие данному мультиплету, характеризуются значениями квантовых чисел  $M^1$ ,  $M^2$ , являющихся собственными значениями проекций операторов  $G^1$  и  $G^2$  соответственно. Мультиплеты и их состояния можно также характеризовать квантовыми числами  $G^1$ ,  $G^2$ ,  $G$ ,  $M$ , которые получаются при связывании двух наших моментов количества движения в общий момент  $G$  с проекцией  $M$ . Матричные элементы всех шести операторов (15.31), берущиеся между состояниями каждого данного мультиплета, легко теперь вычислить, используя стандартную алгебру операторов обычного момента количества движения. Заметим, что здесь, как и для «неоднородной  $G$ -спиновой алгебры», для характеристики отдельных мультиплетов требуются два квантовых числа. Кроме того, требуются еще два квантовых числа для характеристики состояний, принадлежащих каждому данному мультиплету. Алгебры, мультиплеты (неприводимые представления) которых обладают указанным свойством, называются «алгебрами конечного ранга». Ранг алгебры обычного момента количества движения равен единице.

Распадение алгебры инфинитезимальных операторов четырехмерной группы вращений на прямое произведение двух алгебр моментов количества движения отнюдь не общее свойство групп вращений в многомерных пространствах. Например, для группы вращений в пространстве 5 измерений такого распада не получается, и для нее требуется проводить более сложные алгебраические преобразования, чтобы отыскать структуру ее мультиплетов.

Рассмотрим теперь полную группу Лоренца 3+1 измерений. Мы можем взять любое трехмерное подпространство нашего четырехмерного пространства-времени и рассмотреть его так же, как группу Лоренца 2+1 измерений. Операторы (15.31а), которые описывают пространственные повороты, явно не зависят от времени, являются эрмитовыми операторами и коммутируют с гамильтонианом. Операторы (15.31б), которые порождают лоренцевы преобразования, линейно зависят от времени, антиэрмитовы и удовлетворяют коммутационным соотношениям (15.15). Вместо (15.13) и (15.15) теперь получаем

$$G_{ij} = \hbar J_{ij}, \quad (15.37a)$$

$$[H, G_{ij}] = 0, \quad (15.37b)$$

$$iG_{0j} = \hbar J_{0j} - P_j t, \quad (15.38a)$$

$$[H, G_{0j}] = -\hbar P_j, \quad (15.38b)$$

$$[H, P_j] = 0. \quad (15.38c)$$

Коммутационные соотношения для операторов  $P_j$  с гамильтонианом  $H$  являются обычными коммутационными соотношениями для компонент векторного оператора с инфинитезимальными операторами (15.31). В четырехмерном случае это, однако, четыре-вектор, компоненты которого с учетом правильных фазовых множителей равны

$$V_0 = H, \quad (15.39a)$$

$$V_j = -iP_j. \quad (15.39b)$$

Абсолютная величина этого четыре-вектора снова будет скаляром, который будет коммутировать с каждым из инфинитезимальных операторов (15.31), а также с гамильтонианом  $H$ ; его физически надо интерпретировать как квадрат массы:

$$M^2 = \sum_{\mu} V_{\mu}^2 = H^2 - (P_1^2 + P_2^2 + P_3^2). \quad (15.40)$$

Рассмотрим теперь подробнее структуру мультиплетов, или неприводимых представлений неоднородной четырехмерной группы Лоренца. Здесь снова, как и в (15.20), операторы (15.36a), собственные значения которых характеризуют мультиплеты однородной группы, не коммутируют с гамильтонианом; следовательно, их нельзя использовать для характеристики состояний в мультиплетах.

В случае четырехмерной группы Лоренца мы не можем образовать еще один инвариант, беря скалярное произведение вектора энергии-импульса с инфинитезимальными операторами группы, так как эти операторы являются компонентами антисимметричного тензора второго ранга, который не эквивалентен вектору в четырехмерном случае. Антисимметричный тензор третьего ранга, который представляет собой спин в трехмерном случае, будет аксиальным вектором

$$W_{\mu} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} G_{\nu\rho} V_{\sigma}. \quad (15.41)$$

Как легко видеть, этот оператор коммутирует с гамильтонианом, так как

$$\begin{aligned} [H, W_{\mu}] &= \frac{1}{2} \{ \varepsilon_{\mu 0\rho\sigma} [N, G_{0\rho}] + \varepsilon_{\mu\nu 0\sigma} [H, G_{\nu 0}] \} V_{\sigma} = \\ &= \frac{1}{2} i\hbar (\varepsilon_{\mu 0\rho\sigma} P_{\rho} P_{\sigma} + \varepsilon_{\mu\nu 0\sigma} P_{\nu} P_{\sigma}) = 0. \end{aligned} \quad (15.42a)$$

Квадрат оператора (15.41) будет поэтому таким скалярным инвариантом, который коммутирует со всеми инфинитезимальными операторами (15.31), а также и с гамильтонианом  $H$ . Пусть

$$\sum_{\mu} W_{\mu} W_{\mu} \equiv \hbar^2 M^2 S^2, \quad (15.42b)$$

тогда

$$[H, S^2] = [G_{\mu\nu}, S^2] = 0 \quad (15.42в)$$

Таким образом, собственные значения оператора  $S^2$  можно использовать для характеристики отдельных мультиплетов.

Физический смысл операторов  $W_\mu$  и  $S^2$  очень легко понять, рассматривая покоящуюся систему отсчета, в которой операторы  $P_1, P_2, P_3$  имеют нулевые собственные значения. Тогда имеем

$$W_0 = 0 \quad (P_1 = P_2 = P_3 = 0), \quad (15.43а)$$

$$W_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} G_{jk} V_0 = G_{jk} H = G_{jk} M \quad (P_1 = P_2 = P_3 = 0). \quad (15.43б)$$

Таким образом, пространственные компоненты оператора  $W_\mu$  пропорциональны операторам момента количества движения для состояний с нулевым импульсом. Это единственное обобщение результата (15.22б), полученного в случае  $2+1$  измерений. Три оператора  $W_i/M$  являются, следовательно, операторами поворота спина в покоящемся состоянии, а оператор  $S^2$ , определенный в (15.42б), есть оператор полного момента количества движения для состояния с нулевым импульсом, т. е. не что иное, как оператор спина этого состояния.

Итак, неприводимые представления четырехмерной группы Лоренца объединяют состояния, имеющие различные значения импульсов  $P_1, P_2, P_3$ , которые пробегают бесконечное непрерывное множество значений. Мультиплет в целом характеризуется массой и спином. Значение массы определяет конкретный вид соотношения между энергией и импульсом состояния, а значение спина характеризует кратность вырождения состояния с любым заданным значением импульса, а также поведение состояния при обычных поворотах в трехмерном пространстве. Группу преобразований, порождаемых операторами  $W_i$ , а именно группу преобразований, соответствующих фиксированному набору значений импульсов  $P_1, P_2, P_3$ , называют «малой группой». В рассматриваемом сейчас случае четырехмерной группы Лоренца малая группа — это группа обычных трехмерных вращений. В случае более простой группы Лоренца  $2+1$  измерений малая группа — это группа поворотов относительно фиксированной оси.

Как только мы фиксируем значения массы и спина, мы можем построить весь мультиплет состояний неприводимого представления, соответствующего этим значениям. Начнем с  $2S + 1$  состояний с нулевым импульсом, которые переходят друг в друга при пространственных поворотах. Преобразования Лоренца, действуя

щие на эти состояния, изменяют их импульсы (импульсы всегда изменяются при преобразованиях Лоренца). Мы можем выяснить, как эти преобразования Лоренца преобразуют спин, если воспользуемся алгеброй операторов точно так, как в трехмерном случае.

Можно также построить волновые функции состояний в сферических координатах, обобщая способ, использованный в случае простой группы Лоренца  $2+1$  измерений. Поскольку моменты количества движения — это векторы, их нужно связывать по правилам связывания векторов. Их нельзя просто складывать, как в (15.27). Однако окончательный результат по существу оказывается тот же. Полный момент количества движения будет равен векторной сумме орбитального  $L$  и спинного  $S$  моментов количества движения, а состояние будет собственной функцией оператора  $L$ . Это совсем не согласуется с тем выводом, который мог бы сделать читатель, знакомый с теорией уравнения Дирака.

Комбинировать два последовательных преобразования Лоренца в случае группы Лоренца  $3+1$  измерений формально нужно так же, как в случае группы Лоренца  $2+1$  измерений [см. (15.29)]. Произведение двух преобразований Лоренца по двум различным направлениям нельзя представить в виде одного преобразования Лоренца по какому-либо новому направлению, образующему какие-то углы с двумя указанными направлениями, так как это произведение преобразования Лоренца и спинного поворота. Если это преобразование Лоренца применить к состоянию с нулевым импульсом, а затем полученное состояние обратно перевести в это состояние с нулевым импульсом некоторым третьим преобразованием Лоренца, то останется чистый поворот. Этот поворот называется «вигнеровским поворотом».

### § 5. $G$ -спиновые мультиплеты в дираковском представлении

Неприводимые представления четырехмерной группы Лоренца, которые мы только что построили, можно с успехом использовать для описания состояний свободных элементарных частиц в импульсном пространстве. Однако сразу же возникают трудности, когда мы хотим с их помощью описывать элементарную частицу в конфигурационном пространстве, взаимодействующую с внешними полями. Простейшее взаимодействие — это взаимодействие электрически заряженной частицы с внешним электромагнитным полем. Чтобы учесть эффекты этого взаимодействия, нам необходимо иметь выражения для плотности заряда и плотности тока частицы. Плотность «тока-заряда»  $j_\mu(x_\nu)$  представляет собой четыре-векторное поле. При преобразованиях Лоренца индекс  $\mu$  и аргумент  $x$  преобразуются независимо. Преобразование индекса переводит каждую компоненту в некоторую линейную комбина-

цию всех четырех компонент с коэффициентами, не зависящими от  $x$ , причем аргумент  $x$  преобразуется независимо как четыре-вектор. То же самое можно сказать и в отношении фурье-образа тока  $j_\mu(p_\nu)$ . Таким образом, преобразование Лоренца плотности тока-заряда представляется как прямое произведение двух независимых преобразований: одного в пространстве-времени и другого в пространстве «внутреннего индекса».

Неприводимые представления, которые мы построили, имеют конкретный вид (15.29), так что пространственные переменные и переменные внутреннего спина перепутываются преобразованиями Лоренца; спин поворачивается на угол, зависящий не только от параметров, характеризующих данное преобразование Лоренца, но и от значения момента количества движения данного состояния. Дираковское представление обладает той характерной особенностью, что в нем разделены пространственные и спиновые степени свободы частицы, и оно позволяет легко строить разрешенные ковариантные локальные плотности, подобные плотности тока-заряда.

Изучим теперь подробнее это дираковское представление. Начнем со случая группы Лоренца  $2+1$  измерений и исследуем структуру мультиплетов и матричных элементов  $G$ -спиновых операторов в представлении, в котором волновая функция распадается на плоскую волну (по пространственным переменным) и спиновую волновую функцию  $|\xi\rangle$ , которая принадлежит другому спиновому пространству. В дираковском представлении состояние (15.23) записывается в виде

$$|M, S, P_1, P_2\rangle^D = |\xi\rangle |M, 0, P_1, P_2\rangle. \quad (15.44a)$$

Первый множитель в правой части представляет спиновую волновую функцию, второй — плоскую волну. Операторы импульсов действуют только на плоскую волну и никак не действуют на спиновую волновую функцию; плоская волна не зависит от спина, т. е. она является собственной функцией оператора  $(G \cdot V)$  с собственным значением, равным нулю. Действие любого  $G$ -спинового преобразования на состояние (15.44a) факторизуется на два преобразования, действующих по отдельности на оба множителя, так что

$$e^{i\alpha G} |M, S, P_1, P_2\rangle^D = (e^{i\alpha G^{(S)}} |\xi\rangle) (e^{i\alpha G^{(P)}} |M, 0, P_1, P_2\rangle), \quad (15.44б)$$

где

$$(G^{(P)} \cdot V) |M, 0, P_1, P_2\rangle = 0. \quad (15.44в)$$

Операторы  $G^{(S)}$  и  $G^{(P)}$  действуют в спиновом и импульсном пространствах соответственно, и каждый представляется своей матрицей, удовлетворяющей коммутационным соотношениям для  $G$ -спиновых операторов. Матрицы, представляющие оператор  $G^{(P)}$  —

это как раз обычные  $G$ -спиновые матрицы для состояния с нулевым значением спина. Во вспомогательном спиновом пространстве мы можем взять вообще любой набор матриц, удовлетворяющих коммутационным соотношениям для  $G$ -спиновых операторов.

Состояние (15.44а) есть одновременная собственная функция всех компонент вектора  $V$ , т. е.

$$V | M, S, P_1, P_2 \rangle^D = V_{PM} | M, S, P_1, P_2 \rangle^D, \quad (15.44г)$$

где  $V_{PM}$  — набор собственных значений векторного оператора  $V$  для состояния, характеризуемого квантовыми числами  $P_1$ ,  $P_2$  и  $M$ . Таким образом, используя формулы (15.44а) — (15.44г), получаем

$$(G \cdot V) | M, S, P_1, P_2 \rangle^D = \{(G^{(0)} \cdot V_{PM}) | \xi \rangle\} | M, 0, P_1, P_2 \rangle. \quad (15.45а)$$

Поскольку состояние (15.44а) должно быть собственной функцией оператора  $(G \cdot V)$  с собственным значением, равным  $MS\hbar$ , то

$$(G^{(0)} \cdot V_{PM}) | \xi \rangle = \hbar MS | \xi \rangle; \quad (15.45б)$$

этому уравнению должна удовлетворять спиновая волновая функция  $| \xi \rangle$ .

Простейший нетривиальный пример матриц, представляющих алгебру операторов обычного момента количества движения, дают спиновые матрицы Паули. Возьмем три  $G$ -спиновых инфинитезимальных оператора, пропорциональных этим матрицам Паули:

$$G_{12}^{(s)} = \frac{1}{2} \hbar \sigma_A, \quad (15.46а)$$

$$G_{20}^{(s)} = \frac{1}{2} \hbar \sigma_B, \quad (15.46б)$$

$$G_{01}^{(s)} = \frac{1}{2} \hbar \sigma_C. \quad (15.46в)$$

Подставляя (15.46) и (15.45б), получаем

$$\frac{1}{2} \{ \sigma_A E - i \sigma_B P_1 - i \sigma_C P_2 \} | \xi \rangle = \frac{1}{2} M | \xi \rangle, \quad (15.47а)$$

где  $E$  — собственное значение гамильтониана  $H$  и где для спина  $S$  мы взяли собственное значение, равное  $1/2$ . Умножая (15.47а) на  $\sigma_A$  и переставляя матрицы, получаем

$$\begin{aligned} E | \xi \rangle &= \{ i (\sigma_A \sigma_B) P_1 + i (\sigma_A \sigma_C) P_2 + \sigma_A M \} | \xi \rangle = \\ &= \{ -\sigma_C P_1 + \sigma_B P_2 + \sigma_A M \} | \xi \rangle. \end{aligned} \quad (15.47б)$$

Уравнение (15.47б) можно записать в более привычном виде, если обозначить по-другому матрицы Паули  $\sigma_A$ ,  $\sigma_B$ ,  $\sigma_C$  (а именно обо-



значить их  $\beta$ ,  $\alpha_2$ ,  $-\alpha_1$  соответственно). Тогда получим

$$E | \xi \rangle = (\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2 + \beta M) | \xi \rangle. \quad (15.47в)$$

Таким образом, мы убеждаемся, что уравнение, которому должна удовлетворять спиновая волновая функция  $| \xi \rangle$ , оказывается в точности уравнением Дирака.

Мы представили  $G$ -спиновые инфинитезимальные операторы [см. (15.33)] в спиновом пространстве эрмитовыми матрицами, а это находится в явном противоречии с требованием, чтобы операторы  $G_{20}$  и  $G_{01}$  были антиэрмитовы. Но здесь все в порядке, потому что матрицы  $G^{(s)}$  не являются операторами в гильбертовом пространстве.  $G$ -спиновое преобразование, действующее на физическое состояние, определенное (15.44б), требует проведения одновременно двух преобразований: одного в пространстве импульсных переменных и другого во вспомогательном спиновом пространстве. Формальное преобразование, порожаемое матрицей  $G_{20}^{(s)}$  и действующее только в спиновом пространстве, т. е. не сопровождаемое соответствующим преобразованием в импульсном пространстве, не есть преобразование в гильбертовом пространстве. Оно дает вектор состояния, который удовлетворяет условию (15.44а), но который не описывает физического состояния, поскольку не удовлетворяется условию (15.44б) [или эквивалентное ему уравнение Дирака (15.47в) для случая частицы спина  $1/2$ ]. Поскольку матрицы  $G^{(s)}$  не являются операторами в гильбертовом пространстве, требование эрмитовости для полного  $G$ -спинового оператора не законно в отношении матриц  $G^{(s)}$ .

Для данных значений  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $M$  существуют два решения уравнения Дирака (15.47в): одно с положительным и другое с отрицательным собственными значениями энергии. Однако сейчас нам не нужно беспокоиться о физическом смысле состояний с отрицательной энергией, так как оба указанных состояния не связаны друг с другом  $G$ -спиновым преобразованием. Поэтому совершенно законно рассматривать решение с положительной энергией и отбросить решение с отрицательной энергией. Отброшенное решение мы обсудим ниже.

При использовании дираковского представления нам удастся формально отделить друг от друга пространственные и спиновые переменные, что позволяет установить, как инфинитезимальные операторы преобразований Лоренца по отдельности действуют на эти переменные. Получается как будто противоречие с формулой (15.30), устанавливающей, что преобразование Лоренца включает в себя также вигнеровский спиновый поворот, угол которого зависит как от значений параметров преобразования Лоренца, так и от значения импульса состояния. Эта связь между спином и обычным трехмерным пространством не потеряна нами, но теперь она включена в само уравнение Дирака. Фактически надо ввести до-

полнительную степень свободы, чтобы описать спин, и надо обязательно ограничить зависимость волновой функции от этой переменной дополнительным условием (15.45) или (15.46), которое содержит импульс. Таким образом, зависимость преобразования Лоренца от импульса проявляется в зависимости от импульса спиновой волновой функции, описывающей спиновое состояние.

В дираковском представлении не получается простого разделения орбитального и спинового моментов количества движения. Это легко увидеть, построив сферические собственные функции

$$\begin{aligned}
 |M, S, J, M\rangle^D &= N \int_0^{2\pi} d\theta e^{iL\theta} |M, S, P \cos \theta, P \sin \theta\rangle^D = \\
 &= N \int_0^{2\pi} d\theta e^{iL\theta} e^{\alpha(G_{01} \cos \theta - G_{20} \sin \theta)} |M, S, 0, 0\rangle^D = \\
 &= N \int_0^{2\pi} d\theta e^{iL\theta} e^{\alpha(G_{01}^{(s)} \cos \theta - G_{20}^{(s)} \sin \theta)} |\xi\rangle_0 |M, 0, P \cos \theta, P \sin \theta\rangle;
 \end{aligned} \tag{15.48}$$

здесь  $|\xi\rangle_0$  означает спиновую функцию для состояния  $P_1 = P_2 = 0$ . Поскольку переменная интегрирования  $\theta$  появилась в (15.48) как в пространственном, так и в спиновом операторных множителях, мы видим, что собственные функции момента количества движения не разделяются на пространственные и спиновые функции.

Как конкретно происходит перепутывание разных значений  $L$ , легко видеть в случае очень малых  $P$  и  $\alpha$ . С точностью до членов первого порядка по  $\alpha$  имеем

$$e^{\alpha(G_{01}^{(s)} \cos \theta - G_{20}^{(s)} \sin \theta)} \approx 1 + \frac{1}{2} \alpha e^{i\theta} (G_{01}^{(s)} + iG_{20}^{(s)}) + \frac{1}{2} \alpha e^{-i\theta} (G_{01}^{(s)} - iG_{20}^{(s)}), \tag{15.49a}$$

$$\begin{aligned}
 |M, S, J, M\rangle &\approx N \int_0^{2\pi} d\theta \left\{ e^{iL\theta} + \frac{1}{2} \alpha e^{i(L+1)\theta} (G_{01}^{(s)} + iG_{20}^{(s)}) + \right. \\
 &\left. + \frac{1}{2} \alpha e^{i(L-1)\theta} (G_{01}^{(s)} - iG_{20}^{(s)}) \right\} |\xi\rangle_0 |M, 0, P \cos \theta, P \sin \theta\rangle.
 \end{aligned} \tag{15.49б}$$

Ведущий член в правой части формулы (15.49б) записан так, что орбитальный множитель с моментом количества движения  $L$  отделен от спинового множителя с моментом  $S$ . Поправочные члены

линейные по  $\alpha$  («малые компоненты»), однако, имеют другую форму; в них появляются моменты  $L + 1$  и  $L - 1$ , и они сопровождаются  $G$ -спиновыми «сдвиговыми» операторами, действующими в спиновом пространстве и изменяющими момент количества движения спиновой составляющей волновой функции на  $\pm 1$ , чтобы полный момент количества движения все равно равнялся  $J$ . Состояние (15.49б), таким образом, оказывается состоянием с заданным полным моментом количества движения  $J$ , но в то же время оно является линейной комбинацией состояний с орбитальными моментами  $L, L + 1, L - 1$ . В частном случае спина  $1/2$ , когда  $G$ -спиновые инфинитезимальные операторы являются матрицами Паули, один из двух линейных членов по  $\alpha$  обращается в нуль, так как  $|\xi\rangle$  является двухкомпонентной волновой функцией, которая уничтожается либо повышающим, либо понижающим сдвиговым оператором.

### § 6. Дираковское представление для четырехмерной группы Лоренца. Уравнение Дирака

Обобщим теперь дираковское представление, рассмотренное в § 5, на случай полной группы Лоренца  $3 + 1$  измерений; будем писать

$$|M, S, M_s, P_1, P_2, P_3\rangle^D = |\xi\rangle |M, 0, 0, P_1, P_2, P_3\rangle, \quad (15.50a)$$

где  $M_s$  — добавочное квантовое число, характеризующее величину проекции спина на некоторую ось. Как и в (15.44), инфинитезимальные операторы группы формально можно представить суммой двух операторов: действующего только в спиновом пространстве и действующего в импульсном пространстве, т. е.

$$G_{\mu\nu} = G_{\mu\nu}^{(s)} + G_{\mu\nu}^{(p)}. \quad (15.50б)$$

Второй оператор, входящий в (15.50б), действует на второй множитель в волновой функции (15.50а), и результат его действия определяется полностью, если задана масса  $M$  и установлено, как преобразуются моменты количества движения при преобразовании Лоренца. Шесть матриц  $G_{\mu\nu}^{(s)}$  должны удовлетворять коммутационным соотношениям (15.32) и, следовательно, соответствовать матрицам двух независимых моментов количества движения (15.33), которые обсуждались в § 4 настоящей главы.

В простейшем нетривиальном случае спина  $1/2$  неприводимые представления можно построить двумя разными способами, т. е. взять  $(G^1, G^0) = (1/2, 0)$  или  $(G^1, G^2) = (0, 1/2)$ . При любом выборе операторы  $G_{\mu\nu}^{(s)}$  являются матрицами размерности  $2 \times 2$ , и их мож-

но выразить через спиновые матрицы Паули. Любую из двух указанных возможностей можно использовать для нейтрино.

В случае других элементарных частиц обязательно нужно рассматривать четность. Преобразование пространственной инверсии изменяет направления всех трех пространственных осей на противоположные, но не обращает направления времени. При пространственной инверсии не изменяется ни один из операторов момента количества движения (15.31а), которые являются аксиальными векторами в обычном трехмерном пространстве, но изменяются на противоположные знаки каждого из операторов (15.31б), которые задают полярный вектор в трехмерном пространстве. Таким образом, имеем

$$PG_{ij}\Pi = G_{ij}, \quad (15.51a)$$

$$PG_{0j}\Pi = -G_{0j}, \quad (15.51b)$$

где  $\Pi$  — оператор пространственной инверсии. В более простом случае группы Лоренца  $2 + 1$  измерений преобразование пространственного отражения не доставляет никаких затруднений, так как обращение направлений двух пространственных осей в любой плоскости эквивалентно повороту ее на  $180^\circ$  относительно оси, перпендикулярной этой плоскости, а оператор этой операции уже включен в алгебру операторов группы и его не надо специально к ней добавлять. Когда же мы имеем дело с полной группой Лоренца  $3 + 1$  измерений, преобразование отражения не эквивалентно повороту и представляет собой преобразование, не включенное в собственную группу Лоренца. Если мы включаем в группу преобразование  $\Pi$  и преобразования, порождаемые шестью операторами (15.51), то получаем так называемую *несобственную группу Лоренца*.

Применим теперь преобразование пространственной инверсии к операторам (15.33); в результате получим

$$PG_{ij}^1\Pi = G_{ij}^2, \quad (15.52a)$$

$$PG_{ij}^2\Pi = G_{ij}^1. \quad (15.52b)$$

Следовательно, при пространственной инверсии переставляются друг с другом два независимых момента количества движения (15.33). Чтобы построить неприводимые представления *несобственной* группы Лоренца, включающей преобразование пространственной инверсии, нужно комбинировать пары неприводимых представлений *собственной* группы Лоренца, характеризуемые собственными значениями  $(G^1, G^2) = (m, n)$  и  $(n, m)$ . В частном случае спина  $1/2$ , таким образом, надо комбинировать представления  $(1/2, 0)$  и  $(0, 1/2)$ . Операторы (15.31) поэтому будут матрицами размерности  $4 \times 4$ , действующими на четырехкомпонентные вол-

новые функции для представлений спина  $1/2$  *несобственной* группы Лоренца.

Оператор пространственной инверсии, удовлетворяющий условию (15.51б), должен представлять собой произведение множителя, который действует в спиновом пространстве, и множителя, который действует в трехмерном импульсном пространстве и изменяет направления всех импульсов. Таким образом, мы имеем

$$\Pi = \Pi^{(s)}\Pi^{(p)}. \quad (15.53)$$

В случае спина  $1/2$  оператор  $\Pi^{(s)}$  есть матрица размерности  $4 \times 4$ . Обозначим эту матрицу буквой  $\gamma_0$ ; она должна удовлетворять соотношениям

$$\gamma_0 G_{ij}^{(s)} \gamma_0 = G_{ij}^{(s)}, \quad (15.54a)$$

$$\gamma_0 G_{0j}^{(s)} \gamma_0 = -G_{0j}^{(s)}. \quad (15.54б)$$

Рассматривая матрицу  $\gamma_0$ , удовлетворяющую соотношениям (15.54), мы тем самым выбрали нулевое направление привилегированным. Поскольку коммутационные соотношения (15.32б) симметричны относительно индексов 0, 1, 2, 3, то должны существовать еще три матрицы  $\gamma_k$ , связанные со своими направлениями так же, как матрица  $\gamma_0$  с нулевым направлением. Таким образом, мы имеем четыре матрицы  $\gamma_\mu$ , удовлетворяющие соотношениям

$$\gamma_\mu G_{\rho\sigma} \gamma_\mu = \pm G_{\rho\sigma}; \quad (15.55a)$$

здесь знак  $+$  надо брать при  $\rho \neq \mu$  и  $\sigma \neq \mu$  и знак  $-$  при  $\rho = \mu$  и (или)  $\sigma = \mu$ . Соотношения (15.55a) можно также записать в виде

$$\gamma_\mu G_{\rho\sigma} \gamma_\mu = G_{\rho\sigma} (1 - 2\delta_{\mu\rho} - 2\delta_{\mu\sigma}). \quad (15.55б)$$

Имеется только 16 независимых эрмитовых матриц размерности  $4 \times 4$ . Из них нам нужно отобрать такие 10 матриц  $G_{\mu\nu}$  и  $\gamma_\rho$ , которые удовлетворяли бы коммутационным соотношениям (15.32б) и (15.54). Воспользуемся самым простым способом построения этих матриц: возьмем просто какие-либо 4 эрмитовы матрицы, которые антикоммутируют друг с другом и квадрат каждой из которых равен единице, т. е. возьмем матрицы, удовлетворяющие условиям

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad (15.56a)$$

$$\gamma_\mu = \gamma_\mu^\dagger, \quad (15.56б)$$

и затем матрицы  $G_{\mu\nu}^{(s)}$  построим по формуле

$$G_{\mu\nu}^{(s)} = -\frac{1}{2} i\gamma_\mu \gamma_\nu. \quad (15.57)$$

Из антикоммутационного соотношения (15.56a) немедленно следует, что матрицы (15.57) удовлетворяют коммутационным соотношениям (15.32б) для инфинитезимальных операторов четырехмерной группы вращений, а матрицы  $\gamma_\mu$  удовлетворяют коммутацион-

ным соотношениям четыре-вектора с  $G$ -матрицами (15.57) и, кроме того, соотношениям (15.54). Мы не можем получить, как в случае группы Лоренца  $2 + 1$  измерений, аналога соотношения (15.456), поскольку теперь не существует инварианта  $(G \cdot V)$ . Инвариант же  $W_\mu W_\mu$  [см. (15.426)] оказывается слишком сложным. Вместо него мы можем использовать новый четыре-вектор  $\gamma_\mu$ , чтобы построить важный инвариант в рассматриваемом случае полной группы Лоренца  $3 + 1$  измерений.

«Скалярное» произведение вектора  $\gamma_\mu$  и вектора  $V_\mu$ , определяемого формулой (15.39), коммутирует (по построению) с инфинитезимальными операторами (15.506), выраженными в виде суммы операторов, действующих в импульсном пространстве, и операторов, действующих в спиновом пространстве, т. е.

$$[\gamma_\mu V_\mu, G_{\mu\nu}^{(s)} + G_{\mu\nu}^{(p)}] = 0. \quad (15.58a)$$

Чтобы найти собственные значения операторов, мы можем, как и в случае группы Лоренца  $2 + 1$  измерений, взять состояние с нулевым импульсом  $P_1 = P_2 = P_3 = 0$ . На состояние с нулевым импульсом оператор  $\gamma_\mu V_\mu$  действует очень просто:

$$(\gamma_\mu V_\mu) | M, S, M_s, 0, 0, 0 \rangle = M \gamma_0 | M, S, M_s, 0, 0, 0 \rangle. \quad (15.58b)$$

Состояние с нулевым импульсом нужно взять так, чтобы оно было собственной функцией оператора полного спина и оператора его проекции на некоторую ось. Полный оператор пространственной инверсии  $\gamma_0 \Pi$  коммутирует со спиновыми операторами при нулевом импульсе состояния, так как мы имеем соотношения (15.54). Он коммутирует также и с гамильтонианом, если гамильтониан инвариантен относительно пространственной инверсии. Оператор  $\gamma_0 \Pi$  можно диагонализировать одновременно с отыскиваемыми спиновыми операторами и с гамильтонианом. Поскольку оператор  $\Pi$  переводит состояние с нулевым импульсом само в себя (с точностью до фазового множителя), состояние с нулевым импульсом можно выбрать так, чтобы оно было собственной функцией оператора  $\gamma_0$ , а следовательно, согласно (15.58b), также и собственной функцией оператора  $\gamma_\mu V_\mu$ . Согласно (15.58a), последний оператор остается инвариантным при преобразованиях Лоренца, так что все состояния, которые можно построить из состояния с нулевым импульсом, преобразуя его преобразованиями Лоренца, будут также собственными функциями и оператора  $\gamma_\mu V_\mu$  с тем же самым собственным значением.

Поскольку оператор  $\gamma_0$  имеет собственные числа, равные  $\pm 1$ , то

$$\begin{aligned} (\gamma_\mu V_\mu) | M, S, M_s, P_1, P_2, P_3 \rangle &= \\ &= \pm M | M, S, M_s, P_1, P_2, P_3 \rangle. \end{aligned} \quad (15.59a)$$

Действуя справа и слева на это соотношение оператором  $\gamma_0$ , используя для  $V$  формулы (15.39) и переставляя имеющиеся операторы, получаем

$$\begin{aligned} H | M, S, M_s, P_1, P_2, P_3 \rangle &= \\ &= (i\gamma_0\gamma_i P_i \pm \gamma_0 M) | M, S, M_s, P_1, P_2, P_3 \rangle. \end{aligned} \quad (15.59б)$$

Соотношение (15.59б) можно записать также в виде

$$\begin{aligned} H | M, S, M_s, P_1, P_2, P_3 \rangle &= \\ &= (\alpha_i P_i + \beta M) | M, S, M_s, P_1, P_2, P_3 \rangle, \end{aligned} \quad (15.59в)$$

где мы положили

$$\alpha_i = i\gamma_0\gamma_i, \quad (15.59г)$$

$$\beta = \gamma_0. \quad (15.59д)$$

Матрицы  $\alpha_i$  и  $\beta$  эрмитовы и удовлетворяют соотношениям

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij}, \quad (15.60а)$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \quad (15.60б)$$

$$\beta^2 = 1. \quad (15.60в)$$

Уравнение (15.59в) первоначально было получено Дираком совсем из других соображений. Оно было применено им для описания релятивистского электрона. Если уравнение (15.59в) записать для волновой функции, имеющей по предположению вид (15.50а), то мы увидим, что оно в качестве решения имеет четырехкомпонентные волновые функции  $\psi$ , которые могут представлять физические состояния электрона, обладающего заданным импульсом  $P_i$ . Уравнение (15.59в) можно записать также в конфигурационном пространстве, используя преобразование Фурье; для этого надо только заменить величины  $P_i$  на операторы  $(\hbar/i) (\partial/\partial x_i)$ . Можно также построить выражения для плотности вероятности и плотности тока вероятности с нужными свойствами относительно собственных преобразований Лоренца, а также в этой теории можно просто учесть взаимодействие электрона с внешним электромагнитным полем.

## ЛИТЕРАТУРА

Никаких ссылок на книги и оригинальные статьи мы в тексте не делали. Ниже приводится список книг, к которому читатель сможет при желании обратиться.

### 1. Математические вопросы

Изложение чисто математических вопросов, необходимых для понимания нашей книги, читатель может найти в учебнике

*Jackson J. D.*, *Mathematics for Quantum Mechanics*, Benjamin, New York, 1962.

### 2. Общие руководства

Следующие учебники по квантовой механике будут полезны читателю для справок:

*Baym G.*, *Lectures on Quantum Mechanics*, Benjamin, New York, 1969.  
*Bethe H. A.*, *Intermediate Quantum Mechanics*, Benjamin, New York, 1966. (Имеется перевод: Г. Бете, Квантовая механика, изд-во «Мир», М., 1965.)

*Bohm D.*, *Quantum Theory*, Prentice-Hall, New York, 1951. (Имеется перевод: Д. Бом, Квантовая теория, изд-во «Наука», М., 1965.)

*Dirac P. A. M.*, *Quantum Mechanics*, Oxford University Press, New York, 1947. (Имеется перевод: П. А. М. Дирак, Основы квантовой механики, Физматгиз, 1960.)

*Gottfried K.*, *Quantum Mechanics*, Benjamin, New York, 1966.

*Merzbacher E.*, *Quantum Mechanics*, John Wiley, New York, 1961.

*Messiah A.*, *Quantum Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1961. (Готовится перевод на русский язык в изд-ве «Наука».)

*Schiff L. I.*, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1955. (Имеется перевод: Л. Шифф, Квантовая механика, ИЛ, М., 1957.)

### 3. Специальная литература

Ниже мы даем список книг, в которых отдельные вопросы, затронутые в тексте, изложены более полно.

#### А. Эффект Мессбауэра (гл. 2—4)

*Frauenfelder H.*, *The Mössbauer Effect*, Benjamin, New York, 1962.

#### Б. Проблема многих частиц (гл. 5, 6, 9—11)

*Blatt J. M.*, *Weisskopf V. F.*, *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley, New York, 1952. (Имеется перевод: Дж. Блатт, В. Вайскопф, Теоретическая ядерная физика, ИЛ, М., 1954.)

*Brown G. E.*, *Many-Body Problems*, North-Holland, Amsterdam, 1972.

*Condon E. U.*, *Shortley G. H.*, *Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, New York, 1935. (Имеется перевод: Е. Кондон, Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, М., 1949.)

*de-Shalit A.*, *Talmi I.*, *Nuclear Shell Theory*, Academic Press, New York, 1963.



*Schrieffer J. R.*, Theory of Superconductivity, Benjamin, New York, 1964. (Имеется перевод: Дж. Шриффер, Теория сверхпроводимости, изд-во «Наука», 1970.)

В. Распад каонов (гл. 7)

*Heitler W.*, The Quantum Theory of Radiation, Oxford University Press, New York, 1954. (Имеется перевод: В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, М., 1956.)

Г. Теория рассеяния (гл. 8)

*Goldberger M. L., Watson K. M.*, Collision Theory, John Wiley, New York, 1964. (Имеется перевод: М. Гольдбергер, К. Ватсон, Теория столкновений, изд-во «Мир», М., 1967.)

*Mott N. F., Massey H. S. W.*, The Theory of Atomic Collisions, Oxford University Press, New York, 1949. (Имеется перевод: Н. Мотт, Г. Мессу, Теория атомных столкновений, изд-во «Мир», М., 1969.)

Д. Фейнмановские диаграммы (гл. 12)

*Bjorken J. D., Drell S. D.*, Relativistic Quantum Fields, McGraw-Hill, New York, 1965.

*Sakurai J. I.*, Advanced Quantum Mechanics, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1967.

Е. Симметрии, инвариантности и релятивистская квантовая механика (гл. 13—15)

*Dyson F. J.*, Symmetry Groups, Benjamin, New York, 1965.

*Hamermesh M.*, Group Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1962. (Имеется перевод: М. Хамермеш, Теория групп, изд-во «Мир», М., 1966.)

*Lipkin H. J.*, Lie Groups for Pedestrians, North-Holland, Amsterdam, 1965.

*Wigner E. P.*, Group Theory and Its Applications to Quantum Mechanics, Academic Press, New York, 1959. (Имеется перевод: Е. Вигнер, Теория групп, ИЛ, М., 1961.)

## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Амплитуда рассеяния, аналитические свойства 282, 283  
 Античастицы 496—499  
 Блоховские волны 312, 321  
 Борновский ряд 303—310  
 Борновское приближение 146, 307, 310, 512—517  
 Взаимодействие локальное 211  
 — наблюдателя с системой 36—40  
 — релятивистское 489  
 — спин-орбитальное 350  
 Возбуждения коллективные 393  
 — одночастичные 392—393  
 — частично-дырочные 380, 497  
 — элементарные 331, 332, 387—391, 412  
 — — временная теория 416—418  
 Волновая функция БКШ 367—372  
 — — Хартри — Фока 369  
 Волновые функции дираковские спиновые 547—549  
 Гамильтониан феноменологический 122, 128, 206, 451  
 «Голая» масса 456, 488  
 Группа Лоренца 556—583  
 — Пуанкаре 564  
 Группы Ли 531—537  
 G-спин 561—564  
 G-спиновые мультиплеты 564—569  
 — — в дираковском представлении 575—579  
 Дейтроны 182  
 Дельта-потенциал 278—281  
 — двойной 284—288  
 — — конечного размера 254  
 — с возбужденным состоянием 288—293  
 $\delta$ -функция Дирака 300  
 Детерминант слэтеровский 340  
 Деформация ядер 352, 377  
 — — хартри-фоковское решение 353  
 Динамика решетки 317—324  
 Дисперсионное соотношение Бома — Пайнса 401  
 Дифференциальное сечение рассеяния 145  
 Диэлектрики 316  
 Дырки 496—499  
 Закон сохранения энергии 212, 434  
 Законы сохранения 518—552  
 Зарядовое сопряжение 245—250  
 «Золотое правило» 129, 136, 216, 516  
 Зонный спектр 315—317  
 Излучение классическим осциллятором 105—107  
 — мессбауэровское свободным ядром 122—127  
 — — связанным ядром 63—67  
 Изоспия 137, 177, 277  
 Инвариантность 518—552  
 Инверсия пространственная 522—526  
 Инфракрасные расходимости 233, 234  
 Каоны 206, 276, 293  
 — нейтральные 222—224  
 — распад 206—265  
 — — на три пиона 250  
 — сдвиг массы 232—234  
 — энергетическая ширина 241—245  
 Квазибозоны 394  
 Квазифермионы 394  
 Квазичастичные возбуждения 366  
 Квазичастичный спектр 373  
 Квантованные поля 432—480  
 Квантовая механика многочастичных систем 149—203  
 Кванты 33—36  
 Классический пучок света, измерение поляризации 19—23  
 Контурные интегралы 237  
 Координаты полярные одномерные 267, 269  
 Корреляции парные 363—377  
 — — в ядрах 376, 377  
 Корреляция в основном состоянии 390, 403  
 Крамеровское вырождение 547  
 Лагранжиан 451  
 Лоренцева группа однородная 564  
 — — неоднородная 564  
 — — несобственная 580  
 — — полная 569—575  
 — резонансная кривая 298  
 «Малая группа» 573  
 Масса приведенная 297  
 Матрица плотности 32  
 Матрицы в квантовой механике 44, 45  
 Метод Хартри — Фока 473  
 Модель оболочек в теории ядра 201  
 Моменты спектральной функции энергетического спектра 73—78  
 Мультиплет операторный 534  
 Мультиплеты вырожденных состояний 532, 535, 564—569  
 Мюоны 140  
 Нейтрино 501  
 Несовместимые измерения 44

- Нормальные колебания 93, 111  
 Обменные члены 173  
 Образование пар 491  
 Оператор зарядового сопряжения 247  
 Операторы антилинейные 249, 538  
 — гейзенберговские 417, 421  
 — двухчастичные 169—173  
 — инфинитезимальные 556—561  
 — квазиспиновые 202, 561  
 — квазичастичных возбуждений 334  
 — линейные одночастичные 162—168  
 — преобразований Галилея 557  
 — — Лоренца 557  
 — рождающие коллективные возбуждения 391—395  
 — — одночастичные возбуждения 391—395  
 — тензорные 526  
 — чисел заполнения 168, 169  
 Операция обращения времени 245—250  
 Оптическая теорема 271, 272  
 Отражение в плоскости 247  
 Парадокс Эйнштейна — Розена — Подольского 227—232  
 Передача заряда 276—278  
 — импульса связанной системе 52—148  
 Пион 206  
 Поляризация света, матричное описание 23—25  
 Поляризованные фотоны 17—51  
 Полярон 324  
 — теория 467—473  
 Потенциал короткодействующий 279  
 Правила сумм 413—415  
 Правило Хунда 350  
 Предел сильной связи 473—480  
 Представление Гейзенберга 104  
 — Дирака 575—583  
 Представления полной группы Лоренца 569—575  
 Преобразование Боголюбова — Валатина 367—372  
 — зарядового сопряжения 549—553  
 — комплексного сопряжения 537—539  
 — обращения времени 537—539  
 — четности 531—537  
 Преобразования Галилея 126, 557  
 — дираковских спиновых волновых функций 547—549  
 — калибровочные 539—542  
 — канонические 518, 540  
 — Лоренца 561—564  
 — поворотов 531—537  
 — симметрии 518—552  
 — трансляций 527—537  
 Приближение Томаса — Ферми 335—338  
 — хаотических фаз 391, 396—405, 409  
 — — для электронного газа 298—405  
 — Хартри — Фока 338—346, 378, 421  
 — — временная теория 411—413  
 Призма Николя 19—21  
 Принцип соответствия 45, 501  
 Принципы инвариантности в релятивистской квантовой механике 481—583  
 — симметрии в релятивистской квантовой механике 481—583  
 Проблема многих частиц 325—428  
 Проводники 316  
 Пропагаторы частиц 434—437  
 Процедура «деквантования» 473—480  
 Распад каонов 204—261  
 Рассеяние 266—324  
 — амплитуда 270, 280  
 — в борновском приближении 512—517  
 — неупругое 29  
 — одномерное 266—324  
 — фотонов связанным ядром 131—135  
 — электронов на сложном ядре 142—148  
 Резонансные гигантские состояния 383—387, 395, 405—411  
 — — — ядра  $^{16}\text{O}$  405—411  
 — стационарные состояния 383—387  
 Релятивистская квантовая механика 486—488  
 Ренормализационная процедура 463, 473  
 Сверхпроводимость 198—203  
 Свет неполяризованный 30—33  
 — частично поляризованный 30—33  
 Сдвиг массы каона 232—234  
 Сдвиги фаз 268, 286  
 Сила квадрупольного перехода 389  
 Симметрия отражения и поворотов 268—270  
 — сферическая 247—353  
 — трансляционная 353—356  
 Системы многочастичные 378—382  
 $S$ -матрица 273—275  
 Соотношения антикоммутиационные 156—162  
 — коммутационные 156—162  
 Состояние вакуумное 154—156  
 — — условное 177—179  
 Состояния двухчастичные 156—162  
 — многочастичные 156—162

- Состояния, не изменяющиеся при измерении 40—43  
 — одночастичные 154—156  
 — резонансные гигантские 383—387, 405—411  
 — с отрицательными энергиями 496—499  
 — статистически смешанные 100—102  
 — стационарные 383—387  
 — чистые 100—102  
 Сохранение вероятности 271, 272  
 — импульса 527—531  
 Спектр возбуждений 372—376  
 —  $\gamma$ -квантов 67—70  
 Спин 542—547  
 Спиральность 495, 499—501, 511  
 Структура неоднородных  $G$ -спиновых мультиплетов 564—569  
 — оболочечная атомов 347—353  
 — — атомных ядер 347—353
- Температурный сдвиг 80—85, 113—121  
 Теорема Вигнера — Экарта 526, 535  
 — Голдстоуна 461  
 — оптическая 271, 272  
 Теория БКШ (Бардина — Купера — Шриффера) 198, 363—377, 449  
 — возмущений 298—303, 438—456  
 — — временная 213—217, 234, 442  
 — — невременная 232—234  
 — временная элементарных возбуждений 416—418  
 — полярона 467—473  
 — рассеяния 262—324  
 $T$ -матрица 298—303
- Ультрарелятивистский предел 493—496  
 Ультрафиолетовые расходимости 233, 487, 490  
 Уравнение Бете — Голдстоуна 359  
 — Дирака 503—505, 579—583  
 Уравнения движения линеаризованные 396—398
- Фактор Дебая — Валлера 70—73, 96, 133, 135  
 Фейнмановские диаграммы 233, 432—480  
 — правила 448, 453  
 Ферми-газ 332—335  
 Фермионные пары перекрывающиеся 188—198  
 — — связанные 188, 191—198, 200  
 Ферми-сфера 379, 400, 405  
 Формализм вторичного квантования 153—181
- Формализм диаграммной теории возмущений 438—450  
 — фейнмановских диаграмм 429—480  
 Формула Клейна — Нишины 458  
 — Резерфорда 148  
 Формфактор 69, 131, 143  
 Фотон, поглощение 386  
 Фотоны 17  
 — поляризованные 19—45, 222—224  
 — рассеяние 131—135  
 Функции волновые дираковские 547—549  
 — Грина 303, 305, 418—426, 446  
 — — полюсы 422  
 — спектральные 418—426
- Химический потенциал 370  
 Частица, внутренние степени свободы 542—547  
 — магнитный момент 501—503  
 — релятивистская свободная 491—493  
 Частицы тождественные 153—181  
 — — коммутативные 182—203  
 Четность 245—250, 522—526, 542  
 — внутренняя 246, 506, 542  
 — преобразование 531—537  
 — пространственная 246  
 Число сеньорити 198—203, 352, 376  
 $CP$ -инвариантность 250—255  
 $CP$ -четность 223, 241, 254
- Ширина линии естественная 120  
 Экранирующий множитель 147  
 Электрический заряд 499—501  
 Электронный газ 378, 398—405  
 Энергетическая ширина каона 241—245  
 — щель 198, 201, 372—376  
 Энергетические знаменатели 434—437  
 Энергия резонансная 292  
 Эффект Джозефсона 81  
 — квантовой интерференции 221, 231  
 — Мессбауэра 52—55, 376  
 — — в строго гармоническом кристалле 92—99  
 — — в твердом теле 87—121  
 — — для гармонического осциллятора 111—113  
 — — системы, находящейся в состоянии теплового равновесия 102—105  
 — — — ядра 56—85  
 — — эксперименты 78—80  
 Эффекты релаксационные 113—121
- Ядерные реакции прямые 386  
 Ядерный  $\beta$ -распад 135—142

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора перевода . . . . .	5
Предисловие автора . . . . .	9
<b>I. Поляризованные фотоны в изложении для пешеходов</b>	
Введение . . . . .	17
Глава 1. Поляризованные фотоны и квантовая теория . . . . .	19
§ 1. Измерение поляризации классического пучка света . . . . .	19
§ 2. Матричное описание поляризации света . . . . .	23
§ 3. Преобразование матриц . . . . .	25
§ 4. Неполяризованный и частично поляризованный свет . . . . .	30
§ 5. Введение квантов . . . . .	33
§ 6. Взаимодействие наблюдателя с системой . . . . .	36
§ 7. Состояния, не изменяющиеся при измерении . . . . .	40
§ 8. Измерения с единичными фотонами . . . . .	43
§ 9. Матрицы и измерения в квантовой механике . . . . .	44
Задачи . . . . .	45
<b>II. Передача импульса связанной системе и эффект Мессбауэра</b>	
Введение . . . . .	52
Глава 2. Эффект Мессбауэра для ядра, связанного осциллятором	56
§ 1. Сохранение импульса при резонансном ядерном поглощении . . . . .	56
§ 2. Квантовомеханическое рассмотрение случая свободного ядра . . . . .	59
§ 3. Излучение связанным ядром. Эффект Мессбауэра . . . . .	63
§ 4. Подробности расчета спектра $\gamma$ -квантов . . . . .	67
§ 5. Различные формулы для фактора Дебая — Валлера и их интерпретация . . . . .	71
§ 6. Правила сумм и моменты спектральной функции энергетического спектра . . . . .	73
§ 7. Описание первых экспериментов Мессбауэра . . . . .	78
§ 8. Температурный сдвиг . . . . .	80
Задачи . . . . .	85
Глава 3. Эффект Мессбауэра для ядра в твердом теле . . . . .	87
§ 1. Введение . . . . .	87
§ 2. Эффект Мессбауэра в строго гармоническом кристалле . . . . .	92
§ 3. Фактор Дебая — Валлера и величина эффекта Мессбауэра в случае гармонического кристалла . . . . .	96
§ 4. Статистически смешанные и чистые состояния . . . . .	100
§ 5. Эффект Мессбауэра для системы, находящейся в состоянии теплового равновесия . . . . .	102
§ 6. Излучение классическим осциллятором . . . . .	105
§ 7. Эффект Мессбауэра для гармонического осциллятора и для гармонического кристалла, находящегося в тепловом равновесии . . . . .	107
§ 8. Температурный сдвиг и релаксационные эффекты . . . . .	113

Глава 4. Эффект Мессбауэра и передача импульса связанной системе	122
§ 1. Мессбауэровское излучение свободным ядром	122
§ 2. Излучение связанным ядром	128
§ 3. Рассеяние фотонов связанным ядром	131
§ 4. Ядерный $\beta$ -распад	135
§ 5. Рассеяние электронов на сложном ядре	142
<b>III. Квантовая механика многочастичных систем в изложении для пешеходов (часть 1)</b>	
Введение	149
Глава 5. Тождественные частицы и формализм вторичного квантования	153
§ 1. Введение	153
§ 2. Вакуумное состояние и одночастичные состояния	154
§ 3. Двухчастичные и многочастичные состояния. Коммутационные и антикоммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения	156
§ 4. Линейные одночастичные операторы в формализме вторичного квантования	162
§ 5. Операторы чисел заполнения	168
§ 6. Двухчастичные операторы в формализме вторичного квантования	169
§ 7. Спин и другие степени свободы. Частицы различных типов	173
§ 8. Условное вакуумное состояние	177
Задачи	179
Глава 6. Тождественные композитные частицы и связанные системы	182
§ 1. Введение. Использование формализма вторичного квантования	182
§ 2. Свойства перекрывающихся фермионных пар	188
§ 3. Простая модельная система из перекрывающихся связанных фермионных пар	191
§ 4. Сверхпроводимость и число сеньорити	198
<b>IV. Распад каонов в изложении для пешеходов</b>	
Введение	204
Глава 7. Распад каонов	206
§ 1. Упрощенная модельная теория с одним зарядовым состоянием	206
§ 2. Применение временной теории возмущений в упрощенной модельной теории	213
§ 3. Распады нейтральных каонов	217
§ 4. Нейтральные каоны и поляризованные фотоны	222
§ 5. Система из двух нейтральных каонов	224
§ 6. Парадокс Эйнштейна — Розена — Подольского на примере двухкаонной системы	227
§ 7. Сдвиг массы каона	232
§ 8. Разность масс нейтральных каонов во временной теории возмущений	234
§ 9. Экспоненциальный распад и энергетическая ширина каона	241
§ 10. Четность, зарядовое сопряжение и операция обращения времени	245
§ 11. <i>CPT</i> -инвариантность при распадах каонов	250
Задачи	255

## V. Теория рассеяния в изложении для пешеходов

	Введение . . . . .	262
Глава	8. Одномерное рассеяние в квантовой механике . . . . .	266
§	1. Одномерная задача рассеяния . . . . .	266
§	2. Симметрии отражения и поворотов и сдвиги фаз . . . . .	268
§	3. Сохранение вероятности и оптическая теорема . . . . .	271
§	4. $S$ -матрица . . . . .	273
§	5. Передача заряда при рассеянии каонов на нуклонах и многоканальное рассеяние . . . . .	276
§	6. Дельта-потенциал . . . . .	278
§	7. Аналитические свойства амплитуды рассеяния . . . . .	282
§	8. Двойной дельта-потенциал . . . . .	284
§	9. Дельта-потенциал с возбужденным состоянием . . . . .	288
§	10. Задача рассеяния, соответствующая распаду каона . . . . .	294
§	11. Теория возмущений и $T$ -матрица . . . . .	298
§	12. Функции Грина и борновский ряд . . . . .	303
§	13. Частица в одномерном периодическом потенциале . . . . .	311
§	14. Особенности зонного спектра . . . . .	315
§	15. Динамика решетки. Блоховские электроны и фононы . . . . .	317

## VI. Проблема многих частиц в изложении для пешеходов (часть 2)

	Введение . . . . .	325
Глава	9. Проблема многих частиц в квантовой механике . . . . .	327
§	1. Введение . . . . .	327
§	2. Невзаимодействующий ферми-газ . . . . .	332
§	3. Невзаимодействующие фермионы в поле с медленно меняющимся потенциалом. Приближение Томаса — Ферми . . . . .	335
§	4. Приближение Хартри — Фока . . . . .	338
§	5. Сферическая симметрия и оболочечная структура атомов и атомных ядер . . . . .	347
§	6. Трансляционная симметрия в теории твердого тела и в теории ядерной материи . . . . .	353
§	7. Более точное, чем хартри-фоковское приближение. Остаточное взаимодействие и корреляции . . . . .	356
	Задачи . . . . .	360
Глава	10. Парные корреляции и теория БКШ . . . . .	362
§	1. Введение . . . . .	362
§	2. Упрощенная модельная задача БКШ в пределе сильной связи . . . . .	363
§	3. Волновая функция БКШ и преобразование Боголюбова — Валатина . . . . .	367
§	4. Спектр возбуждений и энергетическая щель . . . . .	372
§	5. Парные корреляции в ядрах . . . . .	376
Глава	11. Элементарные возбуждения в многочастичных системах . . . . .	378
§	1. Два примера многочастичных систем . . . . .	378
§	2. Стационарные и гигантские резонансные состояния . . . . .	383
§	3. Пример элементарных возбуждений . . . . .	387
§	4. Операторы, рождающие коллективные и одночастичные возбуждения . . . . .	391
§	5. Линеаризованные уравнения движения и приближение хаотических фаз . . . . .	396
§	6. Приближение хаотических фаз для электронного газа . . . . .	398
§	7. Гигантские резонансные состояния ядра $^{16}\text{O}$ . . . . .	405
§	8. Временная версия приближения Хартри — Фока . . . . .	411
§	9. Правила сумм . . . . .	413
§	10. Временная теория элементарных возбуждений . . . . .	416

§ 11. Спектральные функции и функции Грина . . . . .	418
Задачи . . . . .	426
<b>VII. Формализм фейнмановских диаграмм в изложении для пешеходов</b>	
Введение . . . . .	329
<b>Глава 12. Фейнмановские диаграммы. Пропагаторы частиц и квантованные поля . . . . .</b>	<b>432</b>
§ 1. Введение . . . . .	432
§ 2. Энергетические знаменатели и пропагаторы частиц . . . . .	434
§ 3. Диаграммный формализм теории возмущений . . . . .	438
§ 4. Квантовополевой способ рассуждений, или искусство рассуждать о квантовой теории поля, на самом деле детально не изучая ее . . . . .	451
§ 5. Теория полярона — простейший пример квантовой теории поля в физике твердого тела . . . . .	467
§ 6. Предел сильной связи, классический предел и процедура «деквантования» . . . . .	473
<b>VIII. Принципы симметрии и инвариантности в релятивистской квантовой механике в изложении для пешеходов</b>	
Введение . . . . .	481
<b>Глава 13. Введение в релятивистскую квантовую механику . . . . .</b>	<b>486</b>
Пролог . . . . .	486
§ 1. Введение . . . . .	488
§ 2. Релятивистская свободная частица . . . . .	491
§ 3. Ультрарелятивистский предел . . . . .	493
§ 4. Состояния с отрицательными энергиями. Дырки и античастицы . . . . .	496
§ 5. Электрический заряд и спиральность . . . . .	499
§ 6. Движение в магнитном поле. Магнитный момент частицы . . . . .	501
§ 7. Уравнение Дирака . . . . .	503
§ 8. Решения уравнения Дирака . . . . .	505
§ 9. Рассеяние в борновском приближении на потенциале, не зависящем от спина . . . . .	512
<b>Глава 14. Инвариантность, преобразование симметрии и законы сохранения . . . . .</b>	<b>518</b>
§ 1. Типы преобразований . . . . .	518
§ 2. Четность и пространственная инверсия . . . . .	522
§ 3. Преобразования трансляций и сохранение импульса . . . . .	527
§ 4. Преобразования четности и трансляций. Преобразования поворотов и группы Ли . . . . .	531
§ 5. Преобразования комплексного сопряжения и обращения времени . . . . .	537
§ 6. Калибровочные преобразования . . . . .	539
§ 7. Спин и внутренние степени свободы частицы . . . . .	542
§ 8. Преобразования дираковских спиновых волновых функций . . . . .	547
§ 9. Преобразование зарядового сопряжения . . . . .	549
Задачи . . . . .	553
<b>Глава 15. Группа Лоренца . . . . .</b>	<b>556</b>
§ 1. Инфинитезимальный оператор преобразования симметрии, явно зависящий от времени . . . . .	556
§ 2. $G$ -спин. Преобразования группы Лоренца $2 + 1$ измерений . . . . .	561
§ 3. Структура неоднородных $G$ -спиновых мультиплетов . . . . .	564
§ 4. Представления полной группы Лоренца . . . . .	569
§ 5. $G$ -спиновые мультиплеты в дираковском представлении . . . . .	574
§ 6. Дираковское представление для четырехмерной группы Лоренца. Уравнение Дирака . . . . .	579
Литература . . . . .	584
Предметный указатель . . . . .	586





Г. ЛИПКИН

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Г. ЛИПКИН

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

---