

Уильям Люиселл

ИЗЛУЧЕНИЕ И ШУМЫ В КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ

В книге излагаются основы квантовой теории электромагнитного поля (при нерелятивистской рассмотрении движения электрона), а также ряд вопросов квантовой статистики и квантовой механики. Наибольшее внимание уделяется математическому аппарату теории. Книга является хорошим пособием для изучения оригинальных теоретических работ и монографий по квантовой теории излучения и квантовой электронике (вопросы когерентности и статистики излучения, взаимодействия интенсивного излучения с веществом, теории приборов квантовой электроники).

Книга будет полезна широкому кругу научных работников, преподавателей, аспирантов и студентов старших курсов физических факультетов.

ОГЛАВЛЕНИЕ

От переводчиков	7
Предисловие	10
Глава I	
ДИРАКОВСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ	
1.1. Введение	15
1.2. Кет-векторы	21
1.3. Скалярное произведение. Бра-векторы	23
1.4. Линейные операторы	29
1.5. Эрмитовы операторы	34
1.6. Задача на собственные значения	36
1.7. Наблюдаемые величины. Полнота. Разложение по собственным кет-векторам. δ -функция Дирака	43
1.8. Матрицы	52
1.9. Матричное представление кет- и бра-векторов и операторов	53
1.10. Функции преобразования. Изменение представления	58
1.11. Квантование. Пример непрерывного спектра	64
1.12. Измерение наблюдаемых величин. Вероятностная интерпретация	76
1.13. Принцип неопределенности Гейзенберга	80
1.14. Динамическое поведение квантовой системы	89
1.15. Представление Шредингера в квантовой механике	93
1.16. Представление Гейзенберга	94
1.17. Представление взаимодействия	100
1.18. Волновая механика	102
1.19. Свободная частица. Изменение во времени волнового пакета с минимальной неопределенностью	104
Глава II	
ПРОСТЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ	
2.1. Введение	110
1. Гармонический осциллятор	112

2.2. Осциллятор в гейзенберговском представлении	112
2.3. Задача о собственных значениях энергия осциллятора	118
2.4. Физическая интерпретация операторов N , a и a^+ . Бозоны и фермионы	123
2.5. Функция преобразования от N -представления к q -представлению	128
2. Спин электрона	130
2.6. Спиновый оператор Паули	130
2.7. Энергия спина в магнитном поле	136
2.8. Оператор спина в гейзенберговском представлении	138
3. Электроны в электрическом и магнитном полях	140
2.9. Гамильтониан электрона в электромагнитном поле	140
Глава III	
ОПЕРАТОРНАЯ АЛГЕБРА	
3.1. Введение	143
1. Произвольные операторы	144
3.2. Некоторые теоремы об операторах	144
2. Бозе-операторы рождения и уничтожения	150
3.3. Нормальное произведение, оператор нормального упорядочения и нормальная форма	151
3.4. Алгебраические свойства бозе-операторов	156
3.5. Решение уравнения Шредингера с помощью нормального упорядочения. Гармонический осциллятор с вынуждающей силой	170
3.6. Уравнение Шредингера для двух независимых пар бозе-операторов	177
3.7. Производящая функция для собственных функций осциллятора. Волновой пакет с минимальной неопределенностью	179
3. Спиновые операторы Паули	185
3.8. Алгебраические свойства спиновых операторов при $s=1/2$	185
Глава IV	
КВАНТОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ	
4.1. Введение	191
4.2. Квантование LC -контура, возбуждаемого генератором	192
4.3. Квантование линии связи, не имеющей потерь	200
4.4. Представление классического поля излучения в полости в виде бесконечного набора осцилляторов Уравнения Максвелла (204). Энергия и импульс поля (205). Разложение векторного потенциала $A(r,t)$ по собственным колебаниям полости (206). Разложение поля по плоским волнам (210). Импульс поля (214)	204
4.5. Квантование электромагнитного поля в вакууме	215
4.6. Спектральная плотность собственных колебаний	218
4.7. Коммутационные соотношения для полей в вакууме, относящиеся к одному моменту времени	220
Коммутационные соотношения для D и A , относящиеся к одному моменту времени (220). Коммутационные соотношения для операторов D и B ,	

относящиеся к одному моменту времени (224). Гейзенберговские уравнения движения для векторов D и B (225)	
4.8. Нулевые флуктуации поля	226
4.9. Классическое поле излучения при наличии источников	230
4.10. Квантование поля при наличии источников	233
Глава V	
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ	
5.1. Введение	237
5.2. Гамильтониан атома в поле излучения	238
5.3. Теория возмущений, зависящих от времени	240
5.4. Поглощение излучения атомом	248
5.5. Индуцированное и спонтанное излучение возбужденного атома	254
5.6. Теория естественной ширины линии излучения	256
5.7. Эффект Допплера	264
5.8. Распространение света в вакууме	271
5.9. Полуклассическая теория электронного спинового резонанса	277
5.10. Влияние соударений на уширение линий двухуровневой спиновой системы	282
5.11. Спиновый резонанс в квантованном поле	283
Глава VI	
КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА	
6.1. Введение	292
6.2. Статистический оператор	295
6.3. Некоторые свойства статистического оператора	297
6.4. Уравнение движения для оператора ρ	299
6.5. Чистое состояние	302
6.6. Энтропия	303
6.7. Матрица плотности для частиц со спином $1/2$	310
6.8. Характеристическая функция	315
6.9. Распределение Пуассона	317
6.10. Экспоненциальное распределение	323
6.11. Сигнал плюс шум	326
6.12. Энтропия сигналов и шумов	330
Глава VII	
КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА АТТЕНЮАТОРОВ И ЛИНЕЙНЫХ УСИЛИТЕЛЕЙ	
7.1. Введение	335
7.2. Модель механизма потерь. Фононы	337
7.3. Уравнения движения аттенюатора	344
7.4. Характеристическая функция аттенюатора. Полуширина линии резонатора	347
7.5. Модель мазера	355

7.6. Мазерные уравнения движения	358
7.7. Мазерная характеристическая функция. Шумовая температура	361
7.8. Стационарные решения для мазера	364
7.9. Параметрический усилитель и модель для преобразователя частоты	367
7.10. Статистические свойства параметрического усилителя	372
7.11. Характеристическая функция для преобразователя частоты	374
Приложение А. Гамильтониан поля излучения в представлении плоских волн	377
Приложение Б. Импульс поля в полости	378
Приложение В. Свойства поперечной δ -функции	379
Приложение Г. Соотношения коммутации для D и B	382
Приложение Д. Гейзенберговские уравнения движения для D и B	383
Приложение Е. Вычисление соотношений коммутации для поля	384
Приложение Ж. Вычисление сумм в уравнении (5.137)	386
Приложение З. Приближенное решение уравнений движения аттенюатора	389
Литература	392
Предметный указатель	395

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

Алгебра некоммутирующих операторов 65	Вектор состояния 23
Амплитуда вероятности 78, 79	Вероятность перехода 247
Ансамбли статистические 220, 232	— — в единицу времени 248
Антикоммутатор 125, 132	Вигнера — Вайскопфа приближение 258
Аттенюатор 335	Волновая функция 19
—, уравнение движения 344	— —, интерпретация вероятностная 76
—, характеристическая функция 347	— —, — геометрическая 19
Бекера — Хаусдорфа теорема 149	— —, представление импульсное 18
Блоха теорема 325	Волновая функция, представление координатное 17
Бора магнетон 91, 136	— — состояния с минимальной неопределенностью 87
Бозоны 123	Волновой пакет 88
—, операторная алгебра 98—134	Вырождение 105
Бра-вектор 26	Гамильтона уравнение 99
—, длина 28	— — для осциллятора 113
—, матричное представление 53	Гамильтониан 112
де-Бройля длина волны 88	— атома в поле излучения 238
Взаимодействия представление 100, 102	— осциллятора 115
Вектор-потенциал 206	Гармонический осциллятор 75
— —, разложение по нормальным колебаниям 206, 210	— — в переменном электрическом
— —, — — плоским волнам 210	

- поле 170
- Гауссов шум 326
- Гауссово распределение 325
- Гейзенберга представление 94
 - — для осциллятора 112
 - — операторов спина 138
 - уравнение движения 94
 - — — для A 235
 - — — — D и B 225
 - — — — линии связи 203
- Гильбертово пространство 29, 126
- Дельта-функция Дирака 29, 43
 - поперечная 234
- Динамические переменные 43, 64
- Динамическое поведение системы 89
- Дипольный момент атома 250
 - — —, матричный элемент 250, 251
- Дирака δ -функция 29, 43
- Дираковская формулировка волновой механики 15, 17
- Длина кет- и бра-векторов 28
- Допплера эффект 264
- Закон сохранения импульса 265
 - Законы сохранения 246, 265
 - — при излучении фотона 265
 - — — квантовых переходах 246
- Золотое правило Ферми 248
- Излучение индуцированное 254
 - спонтанное 254
- Измерение напряженностей поля излучения 228
 - энергии стационарного состояния 257
- Импульс поля излучения 156, 214, 215
- Интеграл движения 104
- Кет-вектор 19, 21
 - , длина 28
 - , матричное представление 53
- Квантование поля излучения 215, 233
 - линии связи 200—204
- Квантовые шумы 336
 - — мазера 272
- Коммутационные соотношения 65
 - — для D и A 220
 - — — D и B 224
- Консервативная система 89
- Кронекера символ 40
- Кулоновская калибровка 230
- Линейное векторное пространство 21
- Лоренцевская форма линии 271, 276
- Лэмбовский сдвиг 257
- Мазер 335, 355
 - , уравнения движения 357
 - , — —, стационарные решения 364
 - , характеристическая функция 361
- Максвелла — Больцмана
 - распределение 308, 309
- Максвелла уравнение 204
- Максвелла уравнение без источников 204
 - — с источниками 230—232
- Матрица 52
 - обратная 52
 - плотности 294
 - унитарная 52, 62
 - эрмитова 52
 - эрмитовски сопряженная 52
- Матричное представление 52
- Модель резонатора 339
- Момент количества движения 130, 131
 - — —, соотношения коммутации 131, 132
- Наблюдаемые величины 43, 44, 64
 - —, измерение 44, 76
 - —, среднее значение по ансамблю 77
- Норма векторов 28
- Нормальная форма функции операторов 154
- Нормальное произведение 151

- Нулевые колебания 108, 192, 351, 354
- Оператор 29
 - нормального упорядочения 151
 - , матричное представление 53, 126
 - обратный 32
 - рождения 103
 - сдвига 70
 - спиновый Паули 130
 - статистический 294
 - тождественного преобразования 30, 32, 39
 - унитарный 67, 90
 - уничтожения 116, 150
 - числа частиц 118, 124, 157
 - эрмитов 34, 64
- Ортогональность 39
- Осциллятор 112
 - , волновые функции 128
 - , гамильтониан 115
 - , производящая функция 179
 - , энергетические уровни 123
- Осцилляторы связанные 177
- Параметрический преобразователь частоты 367
 - — —, уравнения движения 371
 - — —, характеристическая функция 374
 - усилитель 367
 - —, статистические свойства 372
 - —, уравнения движения 371
- Планка распределение 352
- Поглощение излучения 248
- Поле излучения в полости 204
 - — — —, импульс 156, 214
 - — — —, квантование 215, 233
 - — — —, энергия 205
- Полнота системы собственных функций 42, 50
- Полуширина линии резонатора 347
- Представление взаимодействия 100, 102
 - Гейзенберга 102
 - импульсное 20
 - координатное 18
 - матричное 52
 - числа частиц 124
 - Шредингера 93, 102
- Преобразование подобия 63
 - унитарное 63, 90
- Принцип неопределенности 84
 - суперпозиции 22
- Причинность 15, 16
- Пуассона распределение 198, 238, 317
 - скобки 100
- Свободная частица 104
- Сигнал плюс шум 326
- Скалярное произведение 23
- След (шпур) 52
 - спиновых операторов 133
- Собственная функция 104
- Собственные значения 36
 - — импульса 67
 - — координаты 67
 - — колебания плоскости 218
 - — —, спектральная плотность 218
- Собственный вектор 36, 37
- Соответствия принцип 65
- Соотношение неопределенностей 84
 - ортогональности 39
 - ортонормировки 70
 - полноты или замкнутости 42,
- Состояние вакуума 354
 - с минимальной неопределенностью 353
- Спиновые операторы Паули 130, 185
 - — —, базисные векторы 133
 - — —, представление Гейзенберга 138
 - — —, — Шредингера 139
 - — —, собственные значения 133
 - — —, соотношения антикоммутиации 133
 - — —, — коммутации 133
- Статистический оператор 294

- Статистический оператор
 осциллятора в тепловом
 равновесии 308
 — —, уравнение движения 299—302
 — — частиц со спином 310
 — — чистого состояния 302
 Тепловой шум 350, 354
 Унитарное преобразование 63, 90
 Уравнение движения 17
 — — намагниченности 315
 — —, представление взаимодействия
 100
 — —, — Гейзенберга 94
 — —, — Шредингера 17
 Условия нормировки 40
 — ортонормировки 46
 Фермионы 123
 Фононы 337
 Функция преобразования 58, 128
 — распределения вероятностей 87,
 317
 — характеристическая 315
 — — аттенюатора 347
 — — мазера 361
 Функция характеристическая
 осциллятора в тепловом
 равновесии 323—325
 — — преобразователя частоты 374
 Чистое состояние 293, 302
 Шварца неравенство 83
 Ширина линии 256
 — — доплеровская 269
 — — естественная 262
 — —, связанная со столкновениями
 282
 Шпур (см. след) 52
 Шредингера уравнение 17
 — —, зависящее от времени 89
 — —, не зависящее от времени 75
 — —, решение методом нормального
 упорядочения 119
 Шум тепловой 350, 354
 Шумовая температура мазера 361
 — — параметрического усилителя
 374
 — — преобразователя частоты 374
 Экспоненциальное распределение
 323
 Электрона спин 130, 136
 — — в магнитном поле 137
 Электронный спиновый резонанс 277
 — — —, теория квантовая 283
 — — —, — полуклассическая 277
 Энергия поля излучения 205
 Энтропия 303
 — сигналов и шумов 330—333
 Эренфеста теорема 310, 315
 Эрмитово сопряжение 27, 34

ОТ ПЕРЕВОДЧИКОВ

Немногим более 50 лет назад было сделано открытие, которому позднее суждено было сыграть большую роль в создании новой области науки и техники — квантовой электроники. В 1916 г. Альберт Эйнштейн, исследуя равновесие системы атом — поле излучения, показал, что помимо самопроизвольного — спонтанного — излучения при переходе атома из верхнего в нижнее энергетическое состояние должно возникать также индуцированное излучение, вызванное действием на атом электромагнитного поля. Роль индуцированного излучения в работе квантового генератора была выяснена вначале в радиодиапазоне, и лишь позднее представления и методы радиофизики были перенесены в оптику и привели к созданию лазеров. В этой работе очень важное значение имели исследования советских физиков Н. Г. Басова и А. М. Прохорова и американского физика Ч. Таунса. Их достижения в области квантовой электроники отмечены Нобелевской премией.

После изобретения лазера началось бурное развитие квантовой радиофизики в оптическом диапазоне. Ряд тонких вопросов теории лазеров и особенно вопросы взаимодействия лазерного излучения с веществом потребовали применения методов квантовой электродинамики, которая, из «чистой» теории превратилась в основу ряда инженерных расчетов.

Таким образом, возникла необходимость в книге, в которой излагались бы основы квантовой теории поля применительно к нуждам квантовой электроники. Именно такой труд и представляется читателю. В первых трех главах книги излагается математический аппарат квантовой механики, причем в первой главе подробно объясняется система обозначений Дирака. Дираковский формализм широко применяется в теоретических работах по квантовой электронике, и поэтому детальное его описание представляется

весьма полезным. Четвертая и пятая главы книги посвящены теории квантованного электромагнитного поля, а шестая и седьмая — квантовой статистике и теории шумов. Изложение математического аппарата теории, весьма подробное и удачное в педагогическом отношении, облегчает изучение этих трудных вопросов. Вместе с тем нужно отметить, что для изучения ряда вопросов, особенно теории шумов, нужно привлекать одновременно и другие книги и статьи, так как автор не всегда достаточно разъясняет физическую сторону дела. В этой связи следует указать на ряд книг и монографий, в которых изучаются сходные вопросы. Например, статистика электромагнитного поля более подробно, чем у Люиселла, излагается в лекциях Глаубера [1] и в недавно вышедшей в русском переводе книге Клаудера и Сударшана [2]. По отношению к этим книгам труд Люиселла является введением в математический аппарат теории. Формализм матрицы плотности и его использование в квантовой электронике излагаются в книге Файна и Ханина [3] и в статьях, цитированных в этой книге. Для более глубокого изучения квантовой электродинамики можно воспользоваться книгами А. И. Ахиезера и В. Б. Берестецкого [4], Н. Н. Боголюбова и Д. В. Ширкова [5], Гайтлера [6], В. А. Фока [7], В. Б. Берестецкого, Е. М. Лифшица и Л. П. Питаевского [8,9].

Нужно также отметить, что в книге приводятся интересные и оригинальные результаты автора и Геффнера — предложенный ими метод решения уравнения Шредингера — метод упорядочения операторов. Поэтому книга будет интересна также теоретикам, работающим в области физики твердого тела и в других областях физики, где используются методы квантовой теории поля.

В книге такого объема и назначения некоторые просчеты почти неизбежны. Очевидные ошибки автора, которые мы сумели заметить, исправлены в тексте без оговорок.

Подводя итог, можно сказать, что эта книга является очень полезным пособием для изучения математического аппарата современной теоретической квантовой электроники и что тем, кто даст себе труд ее разобрать, она поможет в изучении оригинальных работ по квантовой электронике. Книга переведена и отредактирована С. Н. Столяровым — I и VII главы, В. П. Быковым — II, IV и V главы и В. М. Буймистровым — III и VI главы.

1. Р. Г л а у б е р, Оптическая когерентность и статистика фотонов, в сб. «Квантовая оптика и квантовая радиофизика», «Мир», 1966.
2. Дж. К л а у д е р, Э. С у д а р ш а н, Основы квантовой оптики, «Мир», 1970.
3. В. М. Ф а й н, Я. И. Х а н и н, Квантовая радиофизика «Сов. радио», 1965.
4. А. И. А х и е з е р, В. Б. Б е р е с т е ц к и й, Квантовая электродинамика, «Наука», 1969.
5. Н. Н. Б о г о л ю б о в, Д. В. Ш и р к о в, Введение в теорию квантованных полей, Гостехиздат 1957.
6. В. Г а й т л е р, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.
7. В. А. Ф о к, Работы по квантовой теории поля, Изд-во ЛГУ, Л., 1957.
8. В. Б. Б е р е с т е ц к и й, Е. М. Л и ф ш и ц, Л. П. П и т а е в с к и й, Релятивистская квантовая теория, часть 1, «Наука», 1968.
9. Е. М. Л и ф ш и ц, Л. П. П и т а е в с к и й, Релятивистская квантовая теория, часть 2, «Наука», 1971.

В. Буймистров, В. Быков, С. Столяров

ПРЕДИСЛОВИЕ

До последних лет интересы инженеров, работающих в области электроники, ограничивались в основном применениями основных положений классической физики. Однако после изобретения таких замечательных приборов, как транзистор и мазер (отметим только два), знание квантовой механики стало существенным для инженера, который хочет заниматься исследованиями или понимать основные принципы действия таких приборов. Позднее, с появлением лазеров, внимание инженеров сосредоточилось на квантовой природе света и одновременно возникла необходимость понимания определенных разделов квантовой теории поля и квантовой статистики. В последние годы было написано много прекрасных руководств по этим предметам, но они предназначены для студентов-теоретиков, которые интересуются главным образом физикой высоких энергий. В этих работах теория излагается в релятивистски-ковариантной форме, которая необходима для физики высоких энергий. К сожалению, такая трактовка математически сложна. Однако основные положения теории и математическая техника, которые были развиты в квантовой теории поля, оказались очень полезны во многих проблемах в оптике, физике твердого тела и других областях. Количество таких проблем все время возрастает. Примерами недавно возникших проблем являются эффекты спонтанной эмиссии, квантовые флуктуации и квантовые шумы, ограничивающие чувствительность приемников излучения. Та же техника оказалась полезной при изучении когерентности лазерного света и играет важную роль в теории связи. Однако в этих задачах релятивистская ковариантность теории несущественна. В связи с этим представляется полезным появление книги, которая является введением в квантовую теорию поля и ста-

тистику и не содержит математических сложностей, связанных с полной релятивистской трактовкой поля.

Книга может быть полезной для студентов, изучающих электронику и физику и интересующихся физическими принципами и математической техникой, которые лежат в основе квантовой теории поля и квантовой статистики. Теория взаимодействия излучения с веществом, развитая Дираком, излагается здесь в нерелятивистской форме. Для студентов, которые в дальнейшем столкнутся с физикой высоких энергий, эта книга также может быть полезной как введение в теорию поля. Развитая в книге математическая техника применима и при ковариантной формулировке теории. Изложенные в книге сведения из операторной алгебры могут служить удобным источником справок, так как многие результаты собраны здесь в подходящей для этой цели форме.

Предполагается, что читатель знает шредингеровскую формулировку нерелятивистской квантовой механики и классическую электромагнитную теорию и обладает соответствующей математической подготовкой.

Дираковская формулировка квантовой механики обладает заметными преимуществами, так как использует краткие обозначения и одновременно является весьма общей. Она широко применяется в литературе. Поэтому нам казалось необходимым посвятить первую главу дираковской формулировке квантовой механики. Мы излагаем дираковскую формулировку, опираясь на шредингеровскую формулировку квантовой механики. Предполагается, что читатель знаком с волновыми функциями, с волновым уравнением и т. д. Мы вводим здесь важные понятия квантовой механики, такие, как бра- и кет-векторы, линейные операторы, «наблюдаемые», гильбертово пространство, представления Шредингера, Гейзенберга и представление взаимодействия, принцип неопределенности. Читатель, которому наше изложение покажется излишне кратким, найдет ссылки на более подробное изложение в гл. I.

Гармонический осциллятор играет центральную роль во многих областях теории. Он важен, например, в теории электромагнитного излучения и упругих колебаний в твердых телах. В связи с этим гл. II посвящена изучению квантованного одномерного гармонического осциллятора по Дираку. Осциллятор является хорошим примером для

иллюстрации общей теории. Рассматривая задачу об осцилляторе, можно естественным образом ввести операторы рождения и уничтожения и кванты поля (фотоны, фононы и т. д.).

Другая очень важная элементарная квантовая система — это частица со спиновым моментом $\hbar/2$, или, как обычно говорят, частица со спином $1/2$. Протоны и электроны попадают в эту категорию и подчиняются статистике Ферми — Дирака. Во второй главе вводятся спиновые операторы Паули, которые описывают эти частицы в нерелятивистском приближении, и устанавливаются некоторые полезные свойства операторов Паули.

Наконец, в конце гл. II приводится гамильтониан электрона в электромагнитном поле. Это необходимо для изучения взаимодействия вещества с полем излучения.

Операторы рождения и уничтожения, которые описывают фотоны, и спиновые операторы, которые используются для описания спина электрона, подчиняются некоммутативной алгебре. Многие обычные алгебраические операции нельзя применять в некоммутативной алгебре. В гл. III излагается математическая техника, которая дает несколько необычный, но очень удобный метод обращения с этими операторами. Эта техника была ранее развита теоретиками, работающими в области квантовой теории поля. По существу она очень проста, но ранее была рассеяна по различным статьям и книгам. Книга могла бы быть написана и без этого материала, но тогда было бы гораздо трудней провести многие приведенные здесь расчеты.

Основные положения дираковской теории квантования поля излучения изложены в гл. IV и развиты в гл. V. Эта теория объясняет дуализм волна — частица для света и является основой теории вторичного квантования. Теория вторичного квантования здесь опускается, так как ее введение сильно усложнило бы наше изложение. Глава IV начинается с квантования контура (*LC*-контур и линия передачи без потерь), далее устанавливается связь с квантованием поля излучения. Обсуждаются нулевые колебания поля, соотношения коммутации для поля и квантование поля излучения с источниками.

Теория взаимодействия излучения с веществом излагается в гл. V. В этой главе показывается, каким образом теория Дирака объясняет поглощение и излучение света

атомами и как спонтанное излучение объясняет естественную ширину спектральной линии, связанную с переходами между состояниями атома. В той же главе объясняется эффект Доплера и распространение света в вакууме. В конце главы излагается полуклассическая теория электронного спинового резонанса, а также изучается уширение спектральных линий, обусловленное столкновениями, и влияние квантования поля на спиновый резонанс.

Как отмечалось ранее, физики и инженеры встречаются со все большим числом задач, в которых очень полезно применять статистический оператор квантовой статистики. Гл. VI посвящена статистическому оператору, некоторым из наиболее важных его свойств и ряду его простых применений. Далее вводится понятие энтропии, которое играет существенную роль в теории связи. В квантовой статистике, как и в классической, исключительно важную роль играет характеристическая функция. Она вводится в гл. VI.

Гл. VII посвящена применению принципов, которые были изложены в предыдущих главах. В качестве примера рассматриваются мазер и аттенюатор. Модель аттенюатора полезна для феноменологической трактовки теории релаксации. Силу методов теории поля, развитых в этой книге, можно было бы продемонстрировать и на многих других примерах. Например, на вопросе о когерентности лазерного света (включая опыт Хэнбери — Брауна — Твисса), который был изучен недавно Глаубером, Манделом и Вольфом; или на нелинейных оптических эффектах, таких, как комбинационное рассеяние, гетеродинамирование и т. д., которые широко изучались Бломбергом и сотр. и Франкеном и сотр. Для сокращения объема книги эти вопросы опущены.

Автор с большим удовольствием благодарит доктора Геффнера из Станфордского университета за его ободряющую и полезную критику и обсуждения при написании книги. Доктор Л. Р. Уолкер из фирмы «Лаборатории Белл Телефон» провел много часов, терпеливо обучая меня алгебре бозе-операторов, изложенной в третьей главе; я очень обязан ему. Доктор И. П. Гордон из фирмы «Лаборатории Белл Телефон» постоянно стимулировал мою деятельность; я весьма ему признателен. Я также обязан доктору Д. Валека из Станфордского университета за

разрешение познакомиться с его курсом квантовой электродинамики.

Рукопись книги подвергалась плодотворной и конструктивной критике многих рецензентов. Я хочу специально отметить доктора Е. Вигмана из Калифорнийского университета в Беркли, доктора К. Ф. Квейта из Станфордского университета, доктора Р. Р. Льюиса из Мичиганского университета и доктора М. Лэкса из фирмы «Лаборатории Белл Телефон».

Мисс Лии Давидсен из Станфордского университета, миссис Э. Дженкинс и мисс Дикой Катануаро из фирмы «Лаборатории Белл Телефон» провели много часов, печатая и корректируя рукопись. Их терпение и настойчивость в громадной степени облегчили написание книги.

Уильям Льюиселл

ДИРАКОВСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1.1. Введение

Несудача классической механики при объяснении таких экспериментальных результатов, как устойчивость атомов и вещества, излучение черного тела, теплоемкость твердых тел, корпускулярно-волновой дуализм света и материальных частиц и т. д., привела физиков к ясному пониманию того, что классических понятий, в сущности, недостаточно для описания явлений атомного масштаба. Для объяснения всех указанных выше явлений был необходим существенный отход от многих понятий классической механики. Этот отход от классических понятий был сформулирован в виде некоторого основополагающего закона природы, принятого без доказательства и заключающегося в том, что существует вполне определенная граница точности любых измерений, производимых над физической системой. Иными словами, всякое измерение уже само по себе возмущает систему, и, таким образом, независимо от тщательности, мастерства и изобретательности экспериментатора, всякая система при измерении изменяется неконтролируемым образом. Возмущение, производимое измерением, требует, в свою очередь, видоизменения классического понятия причинности, ибо в классике всегда существует причинная связь между системой и измерением. Все это приводит в конце концов к такой теории, в которой при измерении можно предсказать лишь вероятность получения того или иного результата, а не точное его значение, как это имеет место в классике. Эта вероятностная интерпретация теории существенно отличается от статистической

теории в классической физике. В последней понятие вероятности необходимо лишь в силу тех практических соображений, что очень трудно, например, измерить координаты и импульсы всех 10^{23} газовых молекул макроскопического объема, хотя в принципе это можно было бы сделать с любой наперед заданной степенью точности. В квантовой механике из-за возмущений, вызываемых измерением, точные измерения координат и импульсов невозможны даже в принципе.

С другой стороны, если в течение определенного интервала времени над физической системой не производятся никакие измерения, то в течение этого промежутка времени система подчиняется причинному закону развития.

Иными словами, в отсутствие измерений состояние системы в момент времени t может быть получено из состояния системы в более ранний момент времени t_0 вполне определенным предсказуемым и причинным образом.

Отсутствие причинности и вероятностная интерпретация квантовой механики требуют для ее описания специфической математики, во многом отличной от математики, используемой в классической механике. Изложение этой специфической математики и составляет большую часть настоящей главы.

Классическая механика должна содержаться в квантовой механике как предельный случай, ибо классическая механика справедлива лишь тогда, когда можно пренебречь возмущением, вызываемым измерением. В этом случае квантовое описание системы должно переходить в классическое описание при условии, что квантовая система имеет классический аналог. Этот принцип называется «принципом соответствия». Он ограничивает возможные формы квантовой теории.

В этой главе мы дадим упрощенное рассмотрение дираковской формулировки нерелятивистской квантовой механики.

В большинстве случаев мы будем ограничиваться рассмотрением одномерных задач, так как обобщение задач на трехмерный случай, как правило, является достаточно ясным и простым. Проблема вырождения для простоты также будет обсуждаться только вкратце. В последней части главы будет показано, как

из более общей формулировки Дирака может быть получена шредингеровская формулировка нерелятивистской квантовой механики.

Автор ни в коей мере не претендует на математическую строгость изложения теории и ради простоты опускает многие тонкие и более трудные вопросы. Постулаты теории не будут полными, однако они должны быть вполне достаточными для того, чтобы читатель мог познакомиться со многими математическими методами и физическими понятиями, содержащимися в квантовой механике. Коротко говоря, данная глава предназначена как введение в дираковскую формулировку квантовой механики; для более глубокого изучения этого предмета читатель отсылается к любой из превосходных книг по квантовой механике [1—7].

Дираковская формулировка содержит понятие векторов (и операторов) в пространстве конечного или бесконечного числа измерений. В качестве примера дадим простую иллюстрацию того, как такие векторы появляются в теории. Рассмотрим частицу с массой m , движущуюся в поле одномерного потенциала $V(q)$, где q — координата частицы, которая может принимать любое значение от $-\infty$ до $+\infty$, т. е. частица может находиться в любой точке этого одномерного пространства. Согласно шредингеровской формулировке волновой механики [4] состояние частицы в момент времени t описывается волновой функцией в координатном представлении $\psi(q, t)$. Если над системой не производятся никакие измерения, то это состояние $\psi(q, t)$ развивается только причинным образом из состояния с волновой функцией $\psi(q, t_0)$ в момент времени t_0 согласно волновому уравнению Шредингера, которое имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) \right] \psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t),$$

где \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π .

Вероятностная интерпретация функции $\psi(q, t)$ (необходимая при измерении положения частицы) заключается в следующем: величина $|\psi(q, t)|^2 dq$ дает вероятность нахождения частицы в интервале между q и $q + dq$ в тот момент времени t , когда определяется положение частицы,

Мы можем получить другую волновую функцию, если взять фурье-образ функции $\psi(q, t)$ *)

$$\varphi(p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q, t) \exp\left(-\frac{ipq}{\hbar}\right) dq.$$

Она называется волновой функцией в импульсном представлении, а величина p является импульсом частицы. При этом функция $\varphi(p, t)$ полностью определяется волновой функцией $\psi(q, t)$, которая представляет состояние системы в момент времени t . Следовательно, можно сказать, что функция $\varphi(p, t)$ представляет то же самое динамическое состояние системы, что и функция $\psi(q, t)$. Для импульсной волновой функции $\varphi(p, t)$ вероятностная интерпретация заключается в том, что величина $|\varphi(p, t)|^2 dp$ дает вероятность нахождения импульса частицы в процессе измерения в интервале между p и $p + dp$.

Теория может быть развита одинаковым образом как в координатном, так и в импульсном представлении. Фактически представление играет ту же самую роль, которую играет система координат в обычной геометрии. В обычной геометрии любые задачи могут быть решены с помощью векторов без использования конкретной координатной системы (и, следовательно, в более общем виде). Поэтому интересно задать вопрос: может ли и квантовая механика быть сформулирована в таком виде, который не зависел бы от вида используемого представления? В этом случае все результаты не зависели бы от вида представления. Следует все же подчеркнуть, что в такой формулировке ни в коей мере не должны быть потеряны очевидные преимущества использования конкретного представления. При проведении конкретных вычислений всегда необходимо использовать удобное представление, подобно тому как при проведении конкретных вычислений в векторном анализе всегда может быть выбрана удобная система координат

*) Преобразование Фурье существует лишь тогда, когда существует интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q)|^2 dq$, т. е. функция $\psi(q)$ (а также функция $\varphi(p)$) должна быть квадратично интегрируема.

Именно в этом и заключается основная цель дираковской формулировки квантовой механики: развить теорию, не зависящую от какого-либо определенного представления.

Для того чтобы понять, как развивается программа построения такой теории, попытаемся дать геометрическую интерпретацию волновой функции $\psi(q)$ в момент времени t , воспользовавшись при этом понятием вектора *). Как указывалось ранее, координата q может иметь любое значение в интервале от $-\infty$ до $+\infty$. Для каждого конкретного значения q (например, q_1, q_2, q_3, \dots) волновая функция $\psi(q)$ принимает значения $\psi(q_1), \psi(q_2), \psi(q_3), \dots$. Мы можем теперь представить себе пространство с бесконечным числом измерений, которое имеет систему взаимно перпендикулярных осей, каждая из которых обозначается одним из значений q (q_1, q_2, q_3, \dots), а величины $\psi(q_1), \psi(q_2), \psi(q_3), \dots$ являются проекциями некоторого вектора соответственно на оси координат q_1, q_2, q_3, \dots . Тогда такой вектор представляет состояние системы точно так же, как и его проекции. Так как этот вектор комплексный, то он не является обычным вектором, и поэтому мы должны ввести для него специальное обозначение, так же как это делается для обычного вектора. Для того чтобы отличить его от обычных векторов, Дирак использует для обозначения этого вектора символ $|\psi\rangle$ и называет его кет-вектором или просто кет. В частности, вектор, компоненты которого равны $\psi(q_1), \psi(q_2), \dots$, называется кет-вектором ψ и обозначается $|\psi\rangle$. Рис. 1 схематически показывает вид вектора $|\psi\rangle$ и его «проекции» на указанные выше взаимно перпендикулярные оси. К сожалению, из всех осей могут быть показаны лишь три.

Двигаясь далее по пути аналогии, мы можем сказать, что если A является обычным вектором, а (x, y, z) — декартовы координаты, то вектор A может быть определен путем задания его проекции на эти оси: $A = (A_x, A_y, A_z)$, т. е. вектор A может быть «представлен» с помощью его проекций. Точно так же и кет-вектор $|\psi\rangle$ может быть определен с помощью его проекций на ортогональные

*) Приведенная интерпретация, вообще говоря, некорректна. Однако она может помочь читателю при восприятии векторного пространства, называемого гильбертовым пространством, которое определяется как пространство квадратично интегрируемых функций.

q -оси: $|\psi\rangle = [\psi(q_1), \psi(q_2), \dots]$. Таким образом, величина A представляет вектор точно так же, как это делают его проекции на определенные оси. Аналогичным образом вектор $|\psi\rangle$ представляет состояние системы точно так же, как это делают его проекции на q -оси. В последнем случае говорят, что кет-вектор задается в координатном представлении.

Вектор A может быть также задан с помощью его проекций на оси другой декартовой системы координат (x', y', z') , повернутой относительно системы (x, y, z) : $A = (A_{x'}, A_{y'}, A_{z'})$. Аналогично этому и кет-вектор

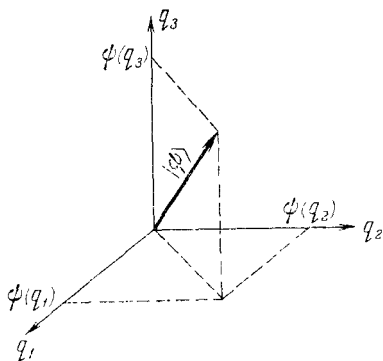


Рис. 1. Наглядная диаграмма кет-вектора и трех его координатных представлений.

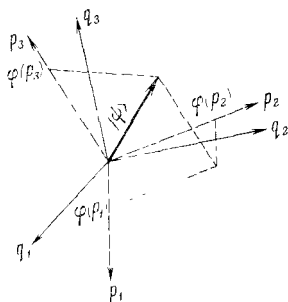


Рис. 2. Наглядная диаграмма кет-вектора и трех его компонент в импульсном пространстве.

$|\psi\rangle$ может быть задан в другом представлении: $|\psi\rangle = [\varphi(p_1), \varphi(p_2), \varphi(p_3), \dots]$. Это представление называется импульсным и может быть выражено через проекции того же самого вектора $|\psi\rangle$ на систему координат, оси которой повернуты по отношению к осям старой системы координат; это показано на рис. 2. При этом связь между величинами q и p определяется преобразованием Фурье.

Отсюда ясно, что должно существовать бесконечное число других эквивалентных представлений состояния системы, которые, очевидно, не могут быть столь наглядными, если не вводить в теорию понятие кет-векторов. Для того чтобы развивать теорию дальше, мы должны теперь более точно определить свойства кет-векторов.

1.2. Кет-векторы

Как уже упоминалось выше, Дирак называет кет-векторами векторы, обозначаемые символом $|a\rangle$, $|x\rangle$ и т. д. Кет-вектор в общем смысле обозначается символом $|\rangle$, а обозначение внутри этого символа указывает на частные кет-векторы.

В связи со сказанным выше, будем с каждым состоянием изучаемой динамической системы связывать определенный кет-вектор. Поскольку мы постулируем принцип суперпозиции состояний, т. е. что линейная суперпозиция состояний системы также является одним из состояний той же системы, то пространство кет-векторов должно быть линейным векторным пространством (см., например, [8]).

Говорят, что векторное пространство является линейным векторным пространством, если оно содержит вместе с кет-векторами $|a\rangle$ и $|b\rangle$ любую их линейную комбинацию вида

$$|u\rangle = c_1 |a\rangle + c_2 |b\rangle, \quad (1.1a)$$

где c_1 и c_2 — произвольные комплексные числа. Линейность векторного пространства является выражением принципа суперпозиции, заключающегося в том, что линейная комбинация двух состояний системы также является состоянием системы.

Если кет-вектор зависит от параметра q' , который может принимать любые значения из некоторого интервала $q_1 \leq q' \leq q_2$, то мы можем обобщить соотношение (1.1a) на случай непрерывного набора состояний:

$$|v\rangle = \int_{q_1}^{q_2} c(q') |q'\rangle dq', \quad (1.1b)$$

где $c(q')$ является обычной (комплексной) функцией параметра q' , а вектор $|v\rangle$ принадлежит кет-пространству. В случае приведенных выше соотношений (1.1a) и (1.1b) говорят, что кет-вектор $|u\rangle$ (или $|v\rangle$) линейно зависит от кет-векторов $|a\rangle$ и $|b\rangle$ (или от $|q'\rangle$). Если в некоторой совокупности (двух или более) кет-векторов ни один из них не может быть выражен в виде линейной комбинации

любых других кет-векторов из данного набора, то говорят, что эти векторы линейно независимы.

Хотя классический и квантовый принципы суперпозиции, как мы увидим ниже, различны, полезно отметить некоторую аналогию между ними. Например, если i , j и k являются тремя взаимно перпендикулярными единичными векторами в обычном пространстве, то любой другой вектор может быть записан в виде линейной комбинации этих трех векторов, т. е. любой другой вектор A может быть записан в виде $A = c_1 i + c_2 j + c_3 k$. С другой стороны, единичный вектор i не может быть выражен в виде линейной комбинации других единичных векторов j и k , и поэтому он, как говорят, линейно независим от j и k .

Если же рассматривается суперпозиция состояния с самим собой, то в результате мы не получим нового состояния, а снова получим первоначальное состояние, т. е. когда складываются величины $c_1 |a\rangle$ и $c_2 |a\rangle$, где c_1, c_2 — произвольные комплексные числа, то получается

$$c_1 |a\rangle + c_2 |a\rangle = (c_1 + c_2) |a\rangle,$$

причем все кет-векторы $c_1 |a\rangle$, $c_2 |a\rangle$, $(c_1 + c_2) |a\rangle$ представляют одно и то же состояние системы, за исключением случая, когда $c_1 + c_2 = 0$. Последний случай соответствует отсутствию состояния вообще. Таким образом, состояние системы целиком определяется «направлением» кет-вектора. А это означает, что кет-векторы $+ |a\rangle$ и $- |a\rangle$ представляют одно и то же состояние. Следовательно, между состоянием системы и «направлением» кет-вектора в пространстве кет-векторов существует взаимно однозначное соответствие. Это утверждение не имеет аналогов в классической механике. Оно показывает, что классический и квантовый принципы суперпозиции отличаются друг от друга.

Действительно, если в классической физике складываются два типа колебаний струны, отличающиеся друг от друга только амплитудой колебаний, то в результате образуется новый тип колебаний с другой амплитудой, т. е. в классической системе различные амплитуды соответствуют различным состояниям системы. Совершенно по-другому обстоит дело в квантовой механике. Согласно сказанному выше все три амплитуды соответствуют одному и тому

же типу колебаний, так как в квантовой механике нет понятия, аналогичного классической амплитуде: существенным является только направление кет-вектора. Кроме того, в квантовой механике вообще нет состояния, в котором полностью отсутствует движение (т. е. состояния с $c_1 + c_2 = 0$, как это имело место в приведенном выше примере): отсутствие какого-либо движения вообще ничему не соответствует в квантовой механике, в то время как в классике состояние покоя является одним из состояний системы.

Пространство кет-векторов, или «векторов состояний», может иметь конечное или бесконечное число измерений. Размерность (или число измерений) пространства определяется количеством линейно независимых кет-векторов в этом пространстве. Так как независимые состояния квантовой системы изображаются независимыми кет-векторами, то размерность пространства определяется числом независимых состояний квантовой системы.

1.3. Скалярное произведение. Бра-векторы

Мы ввели кет-векторы в абстрактном линейном векторном пространстве, утверждая, что их проекции на данную систему ортогональных осей в бесконечномерном пространстве (т. е. в пространстве с бесконечным числом измерений) дают значение волновой функции $\psi(q, t)$ в момент времени t в координатном представлении. Этот формальный прием помогает нам наглядно представить процедуру введения кет-вектора. Наиболее существенный момент в определении кет-векторов состоит в том, что направление вектора в кет-пространстве и каждое состояние системы находятся во взаимно однозначном соответствии между собой.

На определенном этапе изучения обычного векторного анализа вводится скалярное произведение. Одно из возможных определений скалярного произведения состоит в том, что любой паре векторов A и B сопоставляется действительное число f , которое записывается в виде

$$f = (AB).$$

На первый взгляд это определение может показаться весьма странным. Однако после небольшого размышления видно, что это определение является более общим, чем

любая другая формула, которую мы можем привести для вычисления числа f по заданным векторам A и B . Одной из таких формул является формула $f = |A| |B| \cos \vartheta$, где первые два множителя дают абсолютные значения векторов A и B , а ϑ — угол между этими векторами. Однако длина любого вектора уже сама по себе определяется только через скалярное произведение вектора на самого себя, так что в действительности последняя формула не может являться настоящим определением понятия скалярного произведения двух векторов, несмотря на то что она бывает очень полезной на практике.

В более общем понимании скалярное произведение некоторого вектора B со всеми другими векторами A в пространстве может рассматриваться как способ определения самого вектора B . Действительно, если для всех векторов A задается некоторая совокупность чисел $f(B)$, то тем самым определяется и вектор B . Например, в трехмерном пространстве в качестве таких векторов достаточно выбрать три единичных линейно независимых вектора i , j и k и определять любой вектор B с помощью задания скалярного произведения этого вектора B с каждым из этих трех векторов. Таким образом,

$$B_x = (B i), \quad B_y = (B j), \quad B_z = (B k),$$

и три числа B_x , B_y и B_z однозначно определяют вектор B в трехмерном пространстве.

В теории обычных векторов одним из постулатов является утверждение, что указанная выше функция $f(B)$ есть линейная функция вектора B . Это означает, что если B_1 и B_2 — два вектора, то

$$\begin{aligned} (A(B_1 + B_2)) &= (A B_1) + (A B_2), \\ (A(c B)) &= c (A B), \end{aligned}$$

где c — число. Очевидно, что совокупность чисел $f(B)$ может рассматриваться как функция вектора B . Собственно говоря, здесь имеется в виду то же самое, что мы обычно понимаем при определении некоторой функции $\varphi(x)$ от непрерывной переменной x : с каждым x связывается некоторое число $\varphi(x)$.

Все приведенные выше скалярные произведения определены для векторов из одного и того же пространства,

Однако в кристаллографии существует интересный пример, в котором используется понятие скалярного произведения для определения вектора в другом пространстве. Будем считать, что векторы a , b и c являются базисными векторами трансляций кристаллической решетки в обычном пространстве. Мы можем определить базисные векторы трансляций a^* , b^* и c^* в пространстве обратной решетки путем задания скалярных произведений векторов a^* , b^* и c^* на векторы a , b и c . Эти скалярные произведения имеют вид

$$\begin{aligned} (a^* a) &= 1, & (b^* a) &= 0, & (c^* a) &= 0, \\ (a^* b) &= 0, & (b^* b) &= 1, & (c^* b) &= 0, \\ (a^* c) &= 0, & (b^* c) &= 0, & (c^* c) &= 1. \end{aligned}$$

Следовательно, мы определили вектор a^* в другом пространстве с помощью задания скалярного произведения этого вектора с тремя независимыми векторами a , b и c в обычном пространстве.

После этого весьма длинного введения мы определим скалярное произведение кет-векторов следующим образом. Каждому кет-вектору $|a\rangle$ сопоставляется комплексное число f . (В приведенных выше примерах с обычными векторами числа f были действительными, но мы уже упоминали, что кет-векторы являются более общими векторами, чем векторы в обычном пространстве.) Совокупность чисел, связанных с различными кет-векторами $|a\rangle$, является функцией $|a\rangle$. Эта функция должна быть линейной*). Последнее означает, что если $|a_1\rangle$ и $|a_2\rangle$ являются двумя кет-векторами, то комплексное число, связанное с суперпозицией состояний $|a_1\rangle$ и $|a_2\rangle$, является суммой чисел, связанных с состояниями системы $|a_1\rangle$ и $|a_2\rangle$ отдельно; а число, связанное с состоянием системы $c|a\rangle$, где c — комплексное число, равно числу c , умноженному на комплексное число, связанное с состоянием $|a\rangle$, т. е.

$$\begin{aligned} f(|a_1\rangle + |a_2\rangle) &= f(|a_1\rangle) + f(|a_2\rangle), \\ f(c|a_1\rangle) &= cf(|a_1\rangle). \end{aligned} \tag{1.2a}$$

*) Для большей математической строгости следовало бы сказать, что f является линейным функционалом в векторном пространстве.

Как и в случае приведенного выше примера с обратной решеткой, мы можем представить себе числа f , связанные со всеми кет-векторами в кет-пространстве, как координаты некоторого нового вектора в другом пространстве, обозначаемого символом $\langle f |$. Дирак называет векторы, обозначаемые символом $\langle |$, бра-векторами *). Мы можем теперь написать скалярное произведение двух векторов $\langle f |$ и $| a \rangle$ в виде

$$f (| a \rangle) = \langle f | a \rangle. \quad (1.3)$$

Если мы для каждого кет-вектора $| a \rangle$ задаем все числа f , то мы тем самым определяем некоторый бра-вектор $\langle f |$. Пространство бра-векторов отличается от пространства кет-векторов так же, как пространство векторов обратной решетки отличается от пространства векторов основной решетки. Однако определение бра- и кет-векторов является более общим, чем определение обычных векторов, ибо числа f в выражении (1.3) могут быть и комплексными, в то время как в примере с кристаллической решеткой эти числа были действительными.

Если использовать обозначение (1.3), то (1.2а) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \langle f | (| a_1 \rangle + | a_2 \rangle) &= \langle f | a_1 \rangle + \langle f | a_2 \rangle, \\ \langle f | (c | a \rangle) &= c \langle f | a \rangle. \end{aligned} \quad (1.2b)$$

Так как бра-вектор определяется с помощью его скалярного произведения на кет-вектор, то бра-вектор $\langle b |$ равен нулю, т. е. $\langle b | = 0$, если $\langle b | a \rangle = 0$ для любого кет-вектора $| a \rangle$. Аналогично, бра-вектор $\langle b_1 |$ равен бра-вектору $\langle b_2 |$, т. е. $\langle b_1 | = \langle b_2 |$, если $\langle b_1 | a \rangle = \langle b_2 | a \rangle$ для любого кет-вектора $| a \rangle$.

Сумма двух бра-векторов и произведение бра-вектора на число определяются через их скалярное произведение на кет-вектор $| a \rangle$, т. е.

$$\begin{aligned} (\langle b_1 | + \langle b_2 |) | a \rangle &= \langle b_1 | a \rangle + \langle b_2 | a \rangle, \\ (c \langle b |) | a \rangle &= c \langle b | a \rangle. \end{aligned} \quad (1.4)$$

*) Названия «бра» и «кет» происходят от английского слова «bracket» — «скобка». (Прим. перев.)

До сих пор мы определяли бра-векторы только с помощью скалярных произведений этих векторов на кет-векторы, причем между этими бра- и кет-векторами не существовало никакой связи. Для установления такой связи мы сделаем следующее предположение: каждый кет-вектор может быть связан лишь с одним из бра-векторов, и причем единственным способом, т. е. предполагается, что между всеми бра- и кет-векторами существует взаимно однозначное соответствие. Поэтому в дальнейшем имеет смысл приписывать каждому бра-вектору индекс того кет-вектора, с которым он связан. Таким образом, бра-вектор $\langle a |$ связан с кет-вектором $| a \rangle$. Аналогично, с кет-вектором

$$| u \rangle = | a \rangle + | b \rangle \quad (1.5a)$$

связывается соответствующий бра-вектор

$$\langle u | = \langle a | + \langle b | \quad (1.5b)$$

и с кет-вектором

$$| v \rangle = c | a \rangle, \quad (1.6a)$$

где c — комплексное число, связывается бра-вектор

$$\langle v | = c^* \langle a |, \quad (1.6b)$$

где c^* — число, комплексно сопряженное числу c . Мы не будем детально вникать в причину использования величины c^* вместо c , а для простоты примем это утверждение в качестве дополнительного предположения [1]. Удобно называть бра-вектор, связанный с соответствующим ему кет-вектором, его эрмитовски сопряженным вектором и наоборот и записывать это в виде

$$\langle u | = (| u \rangle)^+, \quad | u \rangle = (\langle u |)^+, \quad (1.7)$$

где индекс «+» означает, что любой бра-вектор заменяется на соответствующий ему кет-вектор (и наоборот), а комплексно сопряженное от любого числа, входящего в те или иные соотношения с кет- или бра-вектором, определяется согласно (1.6).

В силу того, что по предположению между бра- и кет-векторами существует вполне определенное однозначное соответствие, направление бра-вектора, как и направление кет-вектора, может в равной степени представлять

состояние квантовой системы. В этом случае говорят, что эти векторы «дуальны» друг другу.

До настоящего момента мы еще не определили длину бра- и кет-векторов. Рассмотрим два кет-вектора $|a\rangle$ и $|b\rangle$ и соответствующие им бра-векторы $\langle a|$ и $\langle b|$. Мы можем образовать из этих векторов четыре числа: $\langle a|b\rangle$, $\langle b|a\rangle$, $\langle a|a\rangle$ и $\langle b|b\rangle$. В общем случае числа $\langle a|b\rangle$ и $\langle b|a\rangle$ будут комплексными, поэтому мы сделаем дополнительное предположение, заключающееся в том, что эти два комплексных числа связаны друг с другом следующим соотношением:

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^* \quad (1.8)$$

В силу этого предположения, если положить $|b\rangle = |a\rangle$, можно сделать вывод, что величина $\langle a|a\rangle$ является вещественной величиной. Если мы определяем длину, или норму, кет-вектора $|a\rangle$ как величину, равную $\langle a|a\rangle$, то, очевидно, если мы хотим, чтобы векторы имели вещественную норму, существенно необходимо предположение (1.8). Сделаем для определенности дальнейшее дополнительное предположение, заключающееся в том, что длина вектора является положительной или равной нулю, т. е.

$$\langle a|a\rangle \geq 0. \quad (1.9)$$

Очевидно, что равенство выполняется только тогда, когда

$$|a\rangle = 0.$$

Предположения (1.8) и (1.9) можно пояснить на примере рассмотрения волновой функции $\psi(q, t)$ и комплексно сопряженной ей функции $\psi^*(q, t)$. Мы рассматриваем волновую функцию $\psi(q, t)$ как совокупность проекций вектора $|\psi\rangle$ в кет-пространстве. Аналогично, мы можем представить волновую функцию $\psi^*(q, t)$ как проекции вектора $\langle\psi|$ в бра-пространстве. Очевидно, что

$$\psi^*(q)\chi(q) = [\chi^*(q)\psi(q)]^*, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(q)|^2 dq \geq 0.$$

Аналогичные соотношения справедливы для бра- и кет-векторов, так как они тесно связаны с волновыми функциями. Это и оправдывает введение предположений (1.8) и (1.9).

Когда речь идет о векторах, то очень важным является также понятие ортогональности. В случае бра- и кет-векторов векторы $\langle a |$ и $| b \rangle$ называются ортогональными, если $\langle a | b \rangle = 0$. В волновой механике функции $\psi^*(q)$ и $\chi(q)$ ортогональны, если $\int \psi^*(q) \chi(q) dq = 0$. Введенная здесь ортогональность отличается от ортогональности двух обычных векторов A и B . Действительно, если $(AB) = 0$, то векторы A и B взаимно перпендикулярны. Но векторы A и B находятся в одном и том же пространстве. Векторы же $\langle a |$ и $| b \rangle$ принадлежат различным пространствам. (Вспомним рассмотренный ранее пример с кристаллической решеткой.)

Тем не менее, если $\langle a | b \rangle = 0$, то можно сказать, что векторы $| a \rangle$ и $| b \rangle$, а также векторы $\langle a |$ и $\langle b |$ ортогональны. Можно также сказать, что если $\langle a | b \rangle = 0$, то квантовые состояния, которые представляют эти векторы, ортогональны.

Пространство называется гильбертовым пространством [8], если норма всех векторов в этом пространстве конечна. Как мы увидим позднее, теория должна включать в себя и векторы с бесконечной нормой. Пространство таких векторов образует более общее векторное пространство, которое называется пространством кет- или бра-векторов либо просто кет- или бра-пространством. Включение векторов с бесконечной нормой требует введения в дальнейшем δ -функции Дирака.

1.4. Лине́йные опера́торы

Понятие линейных операторов уже знакомо читателю. Например, если $f(t)$ — квадратично интегрируемая функция от непрерывной переменной t , то такая функция принадлежит гильбертову пространству [8]. Тогда в этом пространстве можно определить линейный оператор d/dt путем сопоставления функции $f(t)$ другой функции $g(t)$, записываемой в виде

$$g(t) = \frac{d}{dt} f(t).$$

Если в этом пространстве каждой функции $f(t)$ мы ставим в соответствие некоторую другую функцию $g(t)$, то тем самым мы определяем оператор d/dt . Если, кроме того, мы

требуем, чтобы

$$\frac{d}{dt} [f_1(t) + f_2(t)] = g_1(t) + g_2(t), \quad \frac{d}{dt} cf(t) = cg(t),$$

где g_1 , g_2 и g — три различные функции, соответствующие функциям f_1 , f_2 и f , а c — число, то оператор d/dt в этом случае является линейным оператором.

Аналогичным образом можно определить и другие линейные операторы, как, например, операторы интегрирования, умножения на постоянную и многие другие операторы, и построить таким образом целую систему линейных операторов. Ясно, что для того, чтобы расширить область применимости таких операторов, необходимо и сами операторы рассматривать в векторном пространстве.

Поэтому мы должны ввести линейные операторы в пространстве кет- и бра-векторов. Если с каждым кет-вектором $|a\rangle$ мы связываем другой кет-вектор $|b\rangle$ в том же самом пространстве, то связь между этими векторами может быть использована для определения некоторого оператора D . Эту связь мы будем записывать в виде

$$|b\rangle = D |a\rangle, \quad (1.10)$$

где оператор D может означать дифференцирование, интегрирование или еще что-нибудь. Обратим внимание на то, что в дальнейшем оператор всегда записывается слева от кет-вектора, на который он воздействует.

Нас интересуют только линейные операторы; это означает, что если $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle$ и $|a\rangle$ являются кет-векторами и величина c является числом, то оператор D должен удовлетворять следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} D(|a_1\rangle + |a_2\rangle) &= D|a_1\rangle + D|a_2\rangle, \\ D(c|a\rangle) &= cD|a\rangle. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Если известно, каким образом оператор воздействует на каждый кет-вектор в пространстве кет-векторов, то оператор определяется полностью, и два оператора D_1 и D_2 считаются равными друг другу, если $D_1|a\rangle = D_2|a\rangle$ при любом кет-векторе $|a\rangle$. Оператор D равен нулю, если $D|a\rangle = 0$ для любого кет-вектора $|a\rangle$. Оператор тождественного преобразования $D = I$ определяется для каждого кет-вектора $|a\rangle$ равенством $I|a\rangle = |a\rangle$.

Теперь мы можем построить алгебру линейных операторов. Определим сумму двух операторов $D_1 + D_2$ с помощью их действия на кет-вектор $|a\rangle$,

$$(D_1 + D_2) |a\rangle = D_1 |a\rangle + D_2 |a\rangle, \quad (1.12)$$

и произведение двух операторов в виде

$$(D_1 D_2) |a\rangle = D_1 (D_2 |a\rangle). \quad (1.13)$$

Из этого соотношения вытекает, что при $D_1 = D_2$ мы можем определить степени операторов и т. д.

Очевидно, имеют место соотношения

$$\begin{aligned} (D_1 + D_2) |a\rangle &= (D_2 + D_1) |a\rangle, \\ [(D_1 + D_2) + D_3] |a\rangle &= [D_1 + (D_2 + D_3)] |a\rangle, \end{aligned} \quad (1.14)$$

$$[D_1 (D_2 + D_3)] |a\rangle = D_1 D_2 |a\rangle + D_1 D_3 |a\rangle.$$

Алгебра N -мерных квадратных матриц является точно такой же, как и алгебра линейных операторов.

Коммутатор двух операторов D_1 и D_2 записывается в виде $[D_1, D_2]$ и определяется с помощью соотношения

$$[D_1, D_2] \equiv D_1 D_2 - D_2 D_1. \quad (1.15)$$

В общем случае $D_1 D_2 \neq D_2 D_1$, что является свойством не только операторов, но и матриц. Алгебра квантовой механики является некоммутативной алгеброй. Двумя известными некоммутирующими линейными операторами являются, например, оператор $D_1 = x$ (оператор умножения на x) и оператор $D_2 = d/dx$ (оператор дифференцирования по x). Действительно, нетрудно проверить, что если $f(x)$ является непрерывной и дифференцируемой функцией от x , то

$$\left[x, \frac{d}{dx} \right] f(x) \equiv \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} x \right) f(x) = -f(x).$$

Оператор умножения на постоянную является линейным и коммутирует со всеми линейными операторами.

Если два оператора D_1 и D_2 удовлетворяют уравнениям

$$D_1 D_2 = D_2 D_1 = I, \quad (1.16)$$

где I является тождественным оператором, то оператор D_2 , если он существует, является оператором, обратным оператору D_1 . Это записывается в виде

$$D_2 = D_1^{-1}, \quad D_1 = D_2^{-1}. \quad (1.17)$$

Оператор, обратный произведению операторов, имеет вид

$$(D_1 D_2 D_3)^{-1} = D_3^{-1} D_2^{-1} D_1^{-1}. \quad (1.18)$$

Как отмечалось ранее, все эти свойства имеют место и для конечных квадратных матриц. Позднее мы представим операторы с помощью матриц.

Мы определили действие линейных операторов на кет-векторы; теперь мы должны определить, каким образом эти линейные операторы действуют на бра-векторы. Для этого рассмотрим кет-вектор

$$|b\rangle = D |a\rangle.$$

Можно найти скалярное произведение этого кет-вектора на любой бра-вектор, например $\langle c |$; это скалярное произведение $\langle c | b \rangle = \langle c | (D |a\rangle)$ линейно зависит от кет-вектора $|a\rangle$, так как оператор D является линейным оператором. Поэтому скалярное произведение $\langle c | b \rangle$ в силу определения бра-вектора может рассматриваться как скалярное произведение кет-вектора $|a\rangle$ на некоторый бра-вектор, скажем $\langle d |$. Тем самым каждому бра-вектору $\langle c |$ сопоставлен определенный бра-вектор $\langle d |$. При этом бра-вектор $\langle d |$ линейно зависит от $\langle c |$, так что бра-вектор $\langle d |$ получается из бра-вектора $\langle c |$ путем применения к $\langle c |$ некоторого линейного оператора. В силу того, что этот неизвестный оператор определяется единственным способом через D , естественно считать, что он совпадает с оператором D , т. е.

$$\langle d | = \langle c | D.$$

Условимся, что операторы, действующие на бра-векторы, всегда стоят справа от бра-векторов, так что из приведенных выше определений следует:

$$\langle c | (D |a\rangle) = (\langle c | D) |a\rangle. \quad (1.19)$$

Таким образом, нет необходимости использовать в дальнейшем круглые скобки; каждая из двух частей ра-

венства (1.19) может быть записана в виде $\langle c | D | a \rangle$. Следовательно, оператор D может сначала действовать на бра-вектор $\langle c |$, а потом уже полученный результат должен скалярно умножаться на кет-вектор $| a \rangle$, а можно действовать оператором D в обратном порядке. Свойства операторов, определяемые соотношениями (1.11) — (1.14), одинаково справедливы при применении их как к бра-векторам, так и к кет-векторам. Заметим также, что заключенное в скобки выражение $\langle c | D | a \rangle$ является некоторым числом, которое, вообще говоря, может быть комплексным.

Простым примером линейного оператора, который часто встречается в квантовой теории, является оператор $| a \rangle \langle b | = P$. Этот оператор P при действии на некоторый кет-вектор $| c \rangle$ дает выражение

$$P | c \rangle = | a \rangle \langle b | c \rangle,$$

которое представляет собой произведение кет-вектора $| a \rangle$ на некоторое число $\langle b | c \rangle$; а при действии P на бра-вектор $\langle c |$ выражение

$$\langle c | P = \langle c | a \rangle \langle b |$$

является произведением бра-вектора $\langle b |$ на число $\langle c | a \rangle$. В качестве упражнения, которое мы оставляем для читателя, можно показать, что оператор P удовлетворяет всем требованиям, которые предъявляются к линейным операторам. В обычном векторном анализе такому оператору P соответствует диада вида ij (i, j, k — единичные векторы осей x, y и z). Тогда $(ij \cdot k) = 0$, $(i \cdot ij) = j$ и т. д.

В физической интерпретации теории линейные операторы играют основную роль. Поэтому, следуя Дираку, мы предположим, что каждая величина, которая характеризует физическую систему и может быть измерена (и которая называется динамической переменной), описывается вполне определенным линейным оператором. Эти операторы вводятся в следующем разделе. Примерами динамических переменных, которые связаны с соответствующими им линейными операторами, могут быть следующие величины: координата q , импульс p , угловой момент L , энергия H и т. д. Эти величины встречаются и в классической механике. Однако существуют и другие динамические переменные, такие, как например, спиновый угловой момент

σ , не имеющие классических аналогов. В классике все переменные коммутируют друг с другом. В квантовой же механике постулируется, что некоторые из операторов не коммутируют между собой. Тогда, с одной стороны, соотношения коммутации определяют вид алгебры, которой подчиняются эти операторы, а с другой стороны, само существование отличных от нуля коммутаторов связано с важным различием между квантовой и классической механикой.

1.5. Эрмитовы операторы

Линейные операторы, вообще говоря, являются комплексными величинами. Если мы предполагаем, что этим операторам соответствуют некоторые динамические переменные, то тогда последние также должны быть комплексными. Однако такие величины, как импульс, координата и т. д., являются физическими величинами, и поэтому при измерении они принимают действительные значения. Следовательно, на операторы, которые описывают физические величины, должны быть наложены определенные условия, обеспечивающие вещественность соответствующих физических величин. Таким образом, мы приходим к представлению об эрмитовом операторе, который вводится следующим образом.

Бра-вектор, связанный с кет-вектором $|q\rangle$ вида $|q\rangle = L|p\rangle$, где L — линейный оператор, записывается в виде

$$\langle q| = \langle p|L^+ = (L|p\rangle)^+ = (|q\rangle)^+$$

Символом L^+ обозначается оператор, эрмитовски сопряженный оператору L . Иными словами, бра-вектор $\langle q|$, который эрмитовски сопряжен кет-вектору $|q\rangle$, может рассматриваться как результат действия некоторого линейного оператора L^+ [1] на состояние $\langle p|$.

Если мы в соотношении (1.8) примем, что $\langle a| = \langle p|L^+$ и $|a\rangle = L|p\rangle$, то получим

$$\langle p|L^+|b\rangle = \langle b|L|p\rangle^*. \quad (1.20)$$

Последнее равенство является весьма общим, ибо оно справедливо для любых двух кет-векторов $|p\rangle$ и $|b\rangle$ и для любого линейного оператора L .

В соотношении (1.20) оператор L можно заменить на L^+ и получить

$$\langle p | L^{++} | b \rangle = \langle b | L^+ | p \rangle^*.$$

Если мы снова используем соотношение (1.8), в котором на этот раз примем, что $|a\rangle = L^+ |p\rangle$ и $\langle a| = \langle p|L$, то получим

$$\langle p | L | b \rangle = \langle b | L^+ | p \rangle^*.$$

Если мы сравним это выражение с предыдущим, то увидим, что

$$\langle p | L^{++} | b \rangle = \langle p | L | b \rangle.$$

Так как последнее соотношение справедливо для любого кет-вектора $|b\rangle$ и бра-вектора $\langle p|$, то отсюда следует, что

$$L^{++} = L.$$

Если линейный оператор L является самосопряженным оператором, т. е.

$$L = L^+, \quad (1.21)$$

то говорят, что этот оператор является эрмитовым оператором. Из соотношения (1.20) следует, что если оператор L эрмитов, то любые два кет-вектора $|p\rangle$ и $|b\rangle$ должны удовлетворять равенству

$$\langle p | L | b \rangle = \langle b | L | p \rangle^*. \quad (1.22)$$

Справедливо и обратное утверждение: любой оператор, который удовлетворяет соотношению типа (1.22) при любых $|p\rangle$ и $|b\rangle$, является эрмитовым оператором.

Для любого линейного оператора могут быть доказаны следующие соотношения:

$$\begin{aligned} (cL|a\rangle)^+ &= c^* \langle a|L^+ \quad (c - \text{некоторое число}), \\ |(L_1 + L_2)|a\rangle|^+ &= \langle a|(L_1^+ + L_2^+), \\ (L_1L_2|a\rangle)^+ &= \langle a|L_2^{\dagger\dagger}L_1^+, \\ (\langle a|L_1L_2L_3)^+ &= L_3^+L_2^+L_1^+|a\rangle, \\ \langle a|L_1L_2|b\rangle^* &= \langle b|L_2^+L_1^+|a\rangle, \\ (|a\rangle\langle b|)^+ &= |b\rangle\langle a|. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Алгебра сопряженных операторов совпадает с алгеброй конечных квадратных матриц.

1.6. Задача на собственные значения

Как уже отмечалось, бра- и кет-векторы или, точнее, направления этих векторов сопоставляются состояниям системы, а линейные эрмитовы операторы — динамическим переменным, которые описывают поведение системы. В следующем разделе будет показано, как эти общие математические представления связываются с физическими измерениями, проводимыми над системой. Однако прежде следует определить собственные значения эрмитовых операторов.

Задача о собственных значениях является известной задачей не только в классической механике, но и во всей классической физике. Один из самых простых примеров такой задачи состоит в решении уравнения вида

$$L u(x) = \lambda u(x),$$

где $L = d^2/dx^2$, а функция $u(x)$ и постоянная λ неизвестны. Если к этому уравнению добавить граничные условия $u(0) = u(l) = 0$, то можно показать, что величина λ может принимать только вполне определенный дискретный набор собственных значений, определяемых соотношением $\lambda_n = \pi^2 n^2 / l^2$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Связанные с ними собственные функции $u_n(x)$ имеют вид $u_n(x) = \sin(\pi n x / l)$. Заметим, что действие оператора L на собственную функцию $u_n(x)$ сводится к воспроизведению этой функции. Однако если оператор L действует на произвольную функцию $u(x)$, то, вообще говоря, это не должно приводить к воспроизведению той же самой функции $u(x)$.

Точно так же можно сформулировать задачу о собственных значениях в кет- (и бра-) пространстве. Пусть L является линейным оператором, $|a\rangle$ — некоторый вектор. Если оператор L , действуя на этот кет-вектор, снова дает тот же самый кет-вектор $|a\rangle$, умноженный на некоторое число l , то тогда кет-вектор $|a\rangle$ является собственным кет-вектором оператора L , а число l — собственным значением этого оператора. Это утверждение может быть записано в виде

$$L |a\rangle = l |a\rangle.$$

Собственно говоря, в этом и состоит задача о собственных значениях в кет-пространстве: с помощью известного оператора L требуется найти неизвестные кет-вектор $|a\rangle$ и число l так, чтобы при действии оператора L на кет-вектор $|a\rangle$ воспроизводился бы тот же самый кет-вектор $|a\rangle$. Обычно собственный кет-вектор обозначают тем же самым символом, которым обозначается и собственное значение оператора. В этом случае уравнение для задачи на собственные значения записывается в виде

$$L |l\rangle = l |l\rangle. \quad (1.24)$$

Аналогичным образом формулируется задача на собственные значения оператора D для бра-векторов $\langle d |$:

$$\langle d | D = d \langle d |. \quad (1.25)$$

В этой книге мы для простоты будем обычно рассматривать только такие случаи, когда каждому собственному значению соответствует единственный собственный кет- (или бра-) вектор. Если заданному собственному значению соответствует несколько собственных векторов, то говорят, что состояние системы вырождено. Случай вырождения может быть рассмотрен достаточно легко, однако он не будет рассматриваться в дальнейшем для того, чтобы избежать излишнего усложнения формул.

Если $|l\rangle$ является собственным кет-вектором оператора L , то в силу соотношения (1.24) любая постоянная c , умноженная на кет-вектор $|l\rangle$, также дает собственный кет-вектор того же самого оператора L и с тем же самым собственным значением l . В соответствии с нашими предположениями состояния системы, представляемые кет-векторами $|l\rangle$ и $c |l\rangle$, являются одинаковыми.

По причинам, которые станут понятными в следующем разделе, мы будем интересоваться решением задачи на собственные значения только для линейных эрмитовых операторов. Однако прежде, чем переходить к решению конкретных задач, докажем две очень важные теоремы для линейных эрмитовых операторов.

Т е о р е м а 1. Собственные значения линейных эрмитовых операторов вещественны.

Доказательство. Пусть L — линейный эрмитов оператор. Собственные кет-векторы этого оператора

удовлетворяют уравнению

$$L |l\rangle = l |l\rangle.$$

Если мы образуем скалярное произведение обеих сторон этого равенства на бра-вектор $\langle l |$, то получим

$$\langle l | L |l\rangle = l \langle l | l\rangle. \quad (1.26)$$

Теперь, если мы возьмем комплексно сопряженные выражения от обеих сторон этого равенства и воспользуемся соотношением (1.20), то получим

$$\langle l | L |l\rangle^* = \langle l | L^+ |l\rangle = l^* \langle l | l\rangle. \quad (1.27)$$

Из равенств (1.27) и (1.26) видно, что если $\langle l | l\rangle \neq 0$ и оператор L эрмитов, то $l = l^*$. Теорема доказана. Равенство $\langle l | l\rangle = 0$ выполняется только в том тривиальном и неинтересном для нас случае, когда $|l\rangle = 0$.

Т е о р е м а 2. Два собственных вектора линейного эрмитова оператора L , принадлежащие различным собственным значениям, ортогональны.

Доказательство. Пусть l' и l'' — два собственных значения оператора L , а $|l'\rangle$ и $|l''\rangle$ — собственные векторы, соответствующие этим собственным значениям, причем $L = L^+$ и l', l'' вещественны. Тогда

$$L |l'\rangle = l' |l'\rangle, \quad (1.28)$$

$$\langle l'' | L = l'' \langle l''|. \quad (1.29)$$

Если мы образуем теперь скалярные произведения равенства (1.28) на вектор $\langle l'' |$, а равенства (1.29) — на вектор $|l'\rangle$ и вычтем одно из другого, то получим

$$(l' - l'') \langle l'' | l'\rangle = 0.$$

Так как по предположению $l'' \neq l'$, то $\langle l'' | l'\rangle = 0$. Теорема доказана.

Из соотношений (1.28) и (1.29) следует, что собственные значения, соответствующие собственным кет-векторам $|l\rangle$, являются теми же самыми, что и собственные значения для соответствующих бра-векторов $\langle l |$.

Во многих случаях решение задачи на собственные значения является достаточно сложным. Для того чтобы проиллюстрировать метод решения, решим одну очень простую задачу. (В последней главе будет рассмотрена физи-

ческая система, которая соответствует как раз этому примеру. В данный же момент мы рассмотрим этот простой случай лишь как простой математический пример.)

Рассмотрим линейный эрмитов оператор σ_z , который удовлетворяет дополнительному условию

$$\sigma_z^2 = I, \quad (1.30)$$

где I — оператор тождественного преобразования, и решим задачу на собственные значения для оператора σ_z :

$$\sigma_z |s\rangle = s |s\rangle. \quad (1.31)$$

В силу теоремы 1 величина s вещественна, а в силу теоремы 2 величина $\langle s' | s'' \rangle = 0$, если $s' \neq s''$.

Для того чтобы найти собственные значения и собственные векторы оператора σ_z , умножим обе части равенства (1.31) слева на σ_z . Используя соотношения (1.30) и (1.31), получим

$$\sigma_z^2 |s\rangle = |s\rangle = s\sigma_z |s\rangle = s^2 |s\rangle,$$

или

$$(s^2 - 1) |s\rangle = 0.$$

Если мы образуем скалярное произведение этого выражения на вектор $\langle s |$, то в силу того, что величина $\langle s | s \rangle > 0$, мы получим следующие собственные значения оператора σ_z :

$$s = \pm 1.$$

По предположению в системе нет никакого вырождения, и поэтому в данном случае двум собственным значениям соответствуют только два собственных кет-вектора. Поэтому мы можем записать соотношение (1.31) в виде

$$\sigma_z | + 1 \rangle = + 1 | + 1 \rangle, \quad \sigma_z | - 1 \rangle = - 1 | - 1 \rangle. \quad (1.32)$$

В силу теоремы 2

$$\langle + 1 | - 1 \rangle = 0 = \langle - 1 | + 1 \rangle. \quad (1.33)$$

Последние соотношения являются как раз соотношениями ортогональности, которым подчиняются собственные векторы, принадлежащие различным собственным значениям.

Как мы уже знаем, любой собственный кет-вектор, умноженный на постоянную, также является собственным

кет-вектором, принадлежащим тому же самому собственному значению. Поэтому мы можем выбрать постоянную так, чтобы норма собственных векторов равнялась единице (ибо норма ограничена) и написать

$$\langle +1 | +1 \rangle = \langle -1 | -1 \rangle = 1. \quad (1.34)$$

Соотношения (1.34) являются условиями нормировки. Условие нормировки еще не определяет достаточно точно и однозначно единственный кет-вектор. Действительно, мы все еще можем умножить состояние $|+1\rangle$ на $\exp(i\alpha)$, причем состояние $\langle +1 |$ будет при этом умножаться на $\exp(-i\alpha)$, где α — вещественная величина, и в результате соотношение (1.34) останется без изменения. Такой фазовый сдвиг не имеет в теории никакого физического смысла, и поэтому мы будем обычно полагать $\alpha = 0$.

В любой задаче на собственные значения собственные векторы всегда могут быть нормированы на единицу при условии, что норма этих векторов конечна. В результате этого условия (1.33) и (1.34) могут быть объединены в единое условие ортонормировки:

$$\langle l' | l'' \rangle = \delta_{l'l''}, \quad (1.35)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, который определяется так:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j, \\ 0, & \text{если } i \neq j. \end{cases} \quad (1.36)$$

Как мы увидим чуть ниже, эти результаты могут быть обобщены и на тот случай, когда собственные векторы имеют бесконечную норму.

Забегая несколько вперед, мы покажем теперь, что оператор σ_z может быть представлен в виде матрицы с двумя столбцами и двумя строками:

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (1.37)$$

Для того чтобы показать это, образуем скалярные произведения обоих уравнений (1.32) на состояния $\langle +1 |$ и $\langle -1 |$ соответственно. Если использовать условия (1.33) и (1.34), то получим так называемые «матричные

элементы» оператора σ_z :

$$\begin{aligned} \langle +1 | \sigma_z | +1 \rangle &= +1, & \langle +1 | \sigma_z | -1 \rangle &= 0, \\ \langle -1 | \sigma_z | +1 \rangle &= 0, & \langle -1 | \sigma_z | -1 \rangle &= -1. \end{aligned}$$

Теперь мы можем сгруппировать эти результаты в матрицу, подобную матрице (1.37), при условии, что элементы строки этой матрицы соответствуют одинаковым собственным бра-векторам и различным собственным кет-векторам, а элементы столбца — одинаковым собственным кет-векторам и различным собственным бра-векторам.

После этого любой кет-вектор в пространстве кет-векторов может быть выражен через полученные нами два собственных кет-вектора $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$. В этом случае говорят, что собственные кет-векторы образуют полную систему. Здесь мы опять несколько опережаем результаты следующих разделов.

Для того чтобы показать, что любой кет-вектор $|P\rangle$ может быть разложен по собственным кет-векторам $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$, напишем тождество

$$\begin{aligned} |P\rangle &\equiv I|P\rangle = \frac{1}{2}(I + \sigma_z + I - \sigma_z)|P\rangle = \\ &= \frac{1}{2}(I + \sigma_z)|P\rangle + \frac{1}{2}(I - \sigma_z)|P\rangle. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Рассмотрим теперь каждое слагаемое в (1.38) отдельно. С помощью (1.30) получим

$$\sigma_z \left[\frac{1}{2}(I + \sigma_z)|P\rangle \right] = 1 \left[\frac{1}{2}(\sigma_z + I)|P\rangle \right];$$

следовательно, вектор $\frac{1}{2}(I + \sigma_z)|P\rangle$ является собственным кет-вектором оператора σ_z с собственным значением $+1$. Это означает, что он может отличаться от собственного кет-вектора $|+1\rangle$ только постоянным множителем, и поэтому можно написать

$$\frac{1}{2}(I + \sigma_z)|P\rangle = c_1 |+1\rangle, \quad (1.39)$$

где c_1 — постоянная. Аналогичным образом второе слагаемое в тождестве (1.38) можно представить в виде

$$\sigma_z \left[\frac{1}{2}(I - \sigma_z)|P\rangle \right] = -1 \left[\frac{1}{2}(I - \sigma_z)|P\rangle \right],$$

так что имеет место равенство

$$\frac{1}{2} (I - \sigma_z) |P\rangle = c_2 | - 1 \rangle, \quad (1.40)$$

где c_2 — другая постоянная. Таким образом, правая часть тождества (1.38) в силу (1.39) и (1.40) может быть записана в виде

$$|P\rangle = c_1 | + 1 \rangle + c_2 | - 1 \rangle, \quad (1.41)$$

что и утверждалось нами ранее. Следовательно, мы доказали, что любой кет-вектор линейно зависит от собственных кет-векторов $| + 1 \rangle$ и $| - 1 \rangle$ и что система собственных кет-векторов $\{| + 1 \rangle, | - 1 \rangle\}$ составляет полную систему векторов. Однако существует совсем немного задач на собственные значения, для которых доказательство полноты может быть проведено так же, как это мы сделали в приведенном выше простом случае.

На этом простом примере можно вывести так называемые соотношения полноты. Для этого умножим равенство (1.41) слева сначала на $\langle + 1 |$, а затем на $\langle - 1 |$ и используем соотношения ортонормировки (1.33) и (1.34). В результате получим

$$c_1 = \langle + 1 | P \rangle, \quad c_2 = \langle - 1 | P \rangle. \quad (1.42)$$

Если теперь подставить эти соотношения обратно в равенство (1.41), то получим соотношение

$$|P\rangle = (| + 1 \rangle \langle + 1 | + | - 1 \rangle \langle - 1 |) |P\rangle.$$

В силу произвольности вектора $|P\rangle$ последнее соотношение будет выполняться лишь тогда, когда

$$| + 1 \rangle \langle + 1 | + | - 1 \rangle \langle - 1 | \equiv I. \quad (1.43)$$

Соотношение вида (1.43) называется соотношением полноты или замкнутости. Соотношение полноты для произвольных эрмитовых операторов будет обсуждаться в следующем разделе.

В приведенном выше примере с оператором σ_z гильбертово пространство двумерно, потому что мы рассматривали только невырожденные собственные значения.

Если мы подставим выражения (1.42) в соотношения (1.39) и (1.40), то получим

$$\frac{1}{2}(I + \sigma_z) = | + 1 \rangle \langle + 1 |, \quad \frac{1}{2}(I - \sigma_z) = | - 1 \rangle \langle - 1 |. \quad (1.44)$$

Вычитая первое равенство из второго, получим выражение для оператора σ_z :

$$\sigma_z = | + 1 \rangle \langle + 1 | - | - 1 \rangle \langle - 1 |. \quad (1.45)$$

Мы выразили оператор σ_z через операторы вида $| a \rangle \langle a |$, упомянутые нами ранее в конце раздела 1.4.

1.7. Наблюдаемые величины. Полнота. Разложение по собственным кет-векторам. δ -функция Дирака

В предыдущем разделе была решена очень простая задача о собственных значениях оператора σ_z . Было показано, что система собственных кет-векторов является полной системой в том смысле, что любой кет-вектор в кет-пространстве может быть разложен по собственным кет-векторам оператора σ_z . В настоящем разделе будет дана физическая интерпретация собственных значений. Мы обсудим также вопрос о разложении произвольного кет-вектора по собственным кет-векторам эрмитова оператора и покажем, что условие ортонормировки (1.35) может быть обобщено и на тот случай, когда собственные значения эрмитова оператора непрерывны.

С каждой динамической переменной рассматриваемой нами системы связывается вполне определенный эрмитов оператор. При измерении этой переменной мы получаем вещественное число. Поэтому вполне разумно ввести в теорию следующее физическое предположение. Если квантовая система находится в состоянии, которое является определенным собственным состоянием оператора L , например $| l \rangle$, и если мы измеряем в этом состоянии величину L , то мы с определенностью получим при таком измерении величину l . Предположим также обратное. Пусть мы измеряем в системе величину L и всегда с достоверностью получаем значение l . Это означает, что система находится в собственном состоянии $| l \rangle$. Иными словами, если мы измеряем величину L для большого числа тождественных

систем, приготовленных одинаковым способом, и всегда при измерении получаем значение l для каждой системы, то тогда каждая из систем находится в состоянии $|l\rangle$.

Кроме того, если производится единичное измерение величины L над системой, находящейся в произвольном состоянии, то в результате всегда получается одно из собственных значений оператора L , соответствующего величине L . При этом измерение, производимое над системой, находящейся в произвольном состоянии, возмущает саму систему и заставляет ее переходить в одно из собственных состояний, соответствующих измеряемой величине [1]. Если же сразу после этого вторично производится измерение той же самой величины L , то при этом уже с достоверностью получается то же самое собственное значение, которое было при первом измерении.

В дальнейшем предполагается, что любое состояние системы линейно зависит от собственных состояний оператора, соответствующего величине L , т. е. эти собственные состояния величины L образуют полную и замкнутую систему состояний. Те эрмитовы операторы, собственные векторы которых образуют полную систему векторов, называются «наблюдаемыми величинами».

Доказательство полноты и, следовательно, того, что оператор является наблюдаемой величиной, в общем виде невозможно *). Пример с оператором σ_z в предыдущем разделе является лишь частным и весьма простым случаем, когда доказательство полноты системы собственных векторов оказалось возможным. Поэтому в дальнейшем мы всегда будем предполагать, что если некоторая величина может быть измерена, то это значит, что ее собственные кет-векторы образуют полную систему собственных векторов.

Предположение о полноте системы собственных векторов для реально измеряемой величины позволяет разложить произвольное состояние системы по собственным кет-векторам оператора L . В частном случае оператора σ_z мы получили такое разложение в формуле (1.41). Более из-

*) Существует, однако, теорема о спектральном разложении, которая говорит о том, что каждый «разумный» эрмитов оператор может быть разложен на проекции так же, как это сделано в соотношении (1.45) (см. [2], стр. 260). Другие операторы нас не интересуют.

вестным примером полноты некоторого класса функций является пример с разложением периодических функций в ряды Фурье по синусам и косинусам. По отношению к этому классу функций ряд синусов и косинусов образует полную систему функций. Мы подробно рассмотрим этот пример несколько позднее. В случае дискретных собственных значений наблюдаемой величины система собственных кет-векторов $\{|l\rangle\}$ является полной системой, и поэтому любой кет-вектор $|\psi\rangle$ можно разложить по собственным кет-векторам:

$$|\psi\rangle = \sum_l c_l |l\rangle, \quad (1.46)$$

где суммирование распространяется на весь интервал тех значений, которые может принимать величина l . Этот интервал может быть конечным, как это было в случае (1.41) с оператором σ_z , или бесконечным, как это имеет место в случае гармонического осциллятора, который будет рассмотрен в гл. II. С помощью соотношения ортонормировки (1.35) мы можем получить выражения для коэффициентов c_l , которые могут быть, вообще говоря, комплексными числами. Для этого мы умножим обе стороны выражения (1.46) слева на собственный бра-вектор $\langle l' |$ и, используя соотношение (1.35), получим

$$\langle l' | \psi \rangle = \sum_l c_l \langle l' | l \rangle = \sum_l c_l \delta_{l', l} = c_{l'}. \quad (1.47)$$

Если выражение для коэффициентов c_l из последнего соотношения подставить в разложение (1.46), то получим произвольный кет-вектор $|\psi\rangle$ в виде разложения

$$|\psi\rangle = \sum_l |l\rangle \langle l | \psi \rangle \quad (1.48)$$

по собственным кет-векторам оператора L , соответствующего некоторой наблюдаемой величине L . В силу произвольности кет-вектора $|\psi\rangle$ соотношение (1.48) может выполняться тогда и только тогда, когда

$$\sum_l |l\rangle \langle l| = I. \quad (1.49)$$

Последнее выражение и дает соотношение полноты, или замкнутости, для системы с дискретным спектром собственных значений. Пример аналогичного соотношения для оператора σ_z был дан в предыдущем разделе (см. (1.43)).

В целях иллюстрации соотношения ортонормировки (1.35) и разложений (1.46) и (1.48), а также для того, чтобы ввести δ -функцию Дирака, которая нам понадобится в дальнейшем, рассмотрим задачу о разложении некоторой непрерывной функции $f(x)$ по полной системе собственных функций вида

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0}} e^{2\pi i n x / x_0}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.50)$$

Если бы любая непрерывная функция могла быть разложена в ряд по функциям $\{u_n(x)\}$, то можно было бы сказать, что система функций $\{u_n(x)\}$ является полной системой по отношению к классу непрерывных функций. Из вида функций $u_n(x)$ мы сразу находим, что $u_n(x + x_0) = u_n(x)$, так что каждый член ряда является периодической функцией с периодом x_0 . В силу этого непрерывная функция $f(x)$ может быть разложена по функциям $u_n(x)$ только тогда, когда эта функция сама является периодической функцией с периодом x_0 . Поэтому система функций $\{u_n(x)\}$ является полной по отношению к классу непрерывных периодических функций с периодом x_0 , и, следовательно, любая такая функция $f(x)$ может быть представлена в виде

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n u_n(x). \quad (1.51)$$

(Следует заметить, что в такой же ряд могут быть разложены и функции из более общего класса функций, но мы не стремимся к строгости и всеобщности наших рассуждений.) Разложение (1.51) аналогично разложению (1.46).

Соотношения ортонормировки в данном случае принимают форму

$$\int_0^{x_0} u_{n'}^*(x) u_n(x) dx = \delta_{n'n}, \quad (1.52)$$

что аналогично соотношению (1.35) для кет-векторов

Для того чтобы определить коэффициенты c_n в разложении (1.51), умножим обе части равенства (1.51) на $u_n^*(x)$ и проинтегрируем по x от $x = 0$ до $x = x_0$. Получим

$$\int_0^{x_0} f(x) u_n^*(x) dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \int_0^{x_0} u_n^*(x) u_n(x) dx = c_n. \quad (1.53)$$

При этом мы использовали соотношения (1.52). Последнее равенство в (1.53) аналогично соотношению (1.47) для кет-векторов. (Предполагается, что существует интеграл для величины c_n и что в выражении (1.53) можно менять местами суммирование и интегрирование.) Если мы подставим выражение (1.53) в формулу (1.51) и снова поменяем местами суммирование и интегрирование (хотя это и не всегда законно), то получим

$$f(x) = \int_0^{x_0} dx' f(x') \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n^*(x') u_n(x). \quad (1.54)$$

Это выражение аналогично соотношению (1.48) для кет-векторов. Для получения в данном случае соотношения, аналогичного соотношению полноты (1.49) в случае дискретного спектра, необходимо ввести понятие δ -функции Дирака.

Эта функция, впервые введенная Дираком, не является функцией в обычном смысле этого слова. Дирак определил ее как функцию, которая имеет следующие свойства:

$$\delta(x - x') = \begin{cases} 0, & \text{если } x \neq x', \\ \infty, & \text{если } x = x'. \end{cases} \quad (1.55)$$

Отсюда видно, что δ -функция не является обычной функцией. Однако она весьма удобна и возможность ее применения обосновывается теорией распределений*). Наше изложение не будет вполне строгим, и мы определим δ -функцию путем задания ее интегральных свойств:

$$\int_{x' - \epsilon}^{x' + \epsilon} \delta(x - x') dx = 1, \quad (1.56)$$

*) См. приложение А в [2].

где ε — произвольное положительное число, и

$$\int_{x'-\varepsilon}^{x'+\varepsilon} f(x) \delta(x-x') dx = f(x'). \quad (1.57)$$

Кроме того, δ -функция четная:

$$\delta(x) = \delta(-x). \quad (1.58)$$

Для δ -функции существует много интересных представлений. Одно из них, очень полезное, имеет вид

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin ax}{\pi x}. \quad (1.59)$$

Выражение (1.59) действительно обладает свойствами δ -функции, ибо при $x=0$ $\delta(0) = \infty$ и интеграл по переменной x от правой части (1.59) в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ равен единице. Из выражения (1.59) следует также, что

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-a}^a e^{ikx} dx = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{2 \sin ka}{k} = 2\pi \delta(k). \quad (1.60a)$$

Дальнейшее изучение этой интересной функции читатель может продолжить по общеизвестным книгам по квантовой механике [1—5].

Теперь опять перейдем к обсуждению разложения функции $f(x)$ по полной системе функций $u_n(x)$. Сравнивая выражения (1.54) и (1.57), заключаем, что

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n^*(x') u_n(x) = \delta(x' - x),$$

ибо обе части равенства (1.54) должны представлять одну и ту же функцию $f(x)$.

Последнее соотношение и является соотношением полноты, аналогичным соотношению полноты (1.49) для дискретного спектра.

Вернемся к случаю, в котором собственные значения наблюдаемой величины L непрерывны. Если $l' \neq l''$, то и в случае непрерывного спектра мы по-прежнему имеем соотношения ортогональности $\langle l' | l'' \rangle = 0$. Попробуем теперь обобщить соотношение (1.46) (ибо по предположе-

нию и в этом случае собственные векторы образуют полную систему собственных кет-векторов) и разложим два произвольных кет-вектора $|C\rangle$ и $|D\rangle$ в интегралы (вместо рядов) по собственным кет-векторам:

$$|C\rangle = \int c(l') |l'\rangle dl', \quad |D\rangle = \int d(l'') |l''\rangle dl''. \quad (1.61)$$

Скалярное произведение этих векторов имеет вид

$$\langle C | D \rangle = \int dl' c^*(l') \int d(l'') \langle l' | l'' \rangle dl''. \quad (1.62)$$

Так как $\langle l' | l'' \rangle = 0$, когда $l'' \neq l'$, то $\int d(l'') \langle l' | l'' \rangle dl''$ всегда равен нулю, если скалярное произведение $\langle l' | l' \rangle$ конечно, ибо подынтегральное выражение обращается в нуль везде, за исключением одной точки $l'' = l'$. Так как, вообще говоря, $\langle C | D \rangle \neq 0$, то единственный вывод, который можно сделать отсюда, это принять, что $\langle l' | l' \rangle = \infty$. В этом случае приходит на помощь δ -функция Дирака. С ее помощью соотношение ортонормировки (1.35) для непрерывного спектра собственных значений можно обобщить в виде

$$\langle l' | l'' \rangle = \delta(l' - l''). \quad (1.63)$$

Тогда в силу свойства (1.56) для δ -функции собственные векторы непрерывного спектра нормируются так, что

$$\int \langle l' | l'' \rangle dl'' = 1.$$

Если мы используем условие (1.63) в выражении (1.62) и предположим, что $|C\rangle = |D\rangle$, то получим, что

$$\langle C | C \rangle = \int dl' c^*(l') \int c(l'') \delta(l' - l'') dl'' = \int |c(l')|^2 dl' \geq 0. \quad (1.64)$$

Интегрирование во всех выражениях распространяется на весь интервал собственных значений оператора L .

Из соотношений (1.61) и (1.63) можно вывести соотношения полноты для непрерывного спектра. Для этого образуем скалярное произведение

$$\langle l'' | C \rangle = \int c(l') \langle l'' | l' \rangle dl' = \int c(l') \delta(l' - l'') dl' = c(l''). \quad (1.65)$$

Это выражение аналогично соотношению (1.47) для дискретного спектра. Если теперь подставить (1.65) в разложение (1.61), то получим

$$|C\rangle = \int |l'\rangle dl' \langle l'|C\rangle. \quad (1.66)$$

В силу произвольности кет-вектора $|C\rangle$ отсюда следует соотношение полноты для непрерывного спектра собственных значений:

$$\int |l'\rangle dl' \langle l'| = I. \quad (1.67)$$

Заметим теперь, что δ -функция Дирака удобна также и при изучении преобразований Фурье. Например, разложение функции $\psi(q)$ в интеграл Фурье определяется известной формулой

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) \exp\left(+\frac{ipq}{\hbar}\right) dp, \quad (1.68a)$$

а обратное преобразование имеет вид

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q') \exp\left(-\frac{ipq'}{\hbar}\right) dq'. \quad (1.68b)$$

Если подставить интегральное представление $\varphi(p)$ в интеграл для функции $\psi(q)$ и переменить порядок интегрирования, то получим

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \psi(q') \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\hbar} \exp\left[\frac{ip(q-q')}{\hbar}\right] \right\}. \quad (1.69)$$

Последнее интегральное уравнение превращается в тождество, если

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{\hbar} \exp\left[\frac{ip(q'-q'')}{\hbar}\right] = \delta(q' - q''). \quad (1.60b)$$

Последнее выражение с точностью до обозначений совпадает с представлением δ -функции (1.60a).

Заметим, что некоторые наблюдаемые величины обладают одновременно как дискретным, так и непрерывным спектрами. Однако обобщение соотношений ортонормировки и полноты и в данном случае является достаточно простым и ясным.

В заключение этого раздела мы очень кратко обсудим вопрос о функциях $f(L)$ наблюдаемой величины L . Если функция $f(L)$ может быть разложена в степенной ряд, то, применяя несколько раз уравнение для собственных значений

$$L |l\rangle = l |l\rangle, \quad (1.70)$$

получим

$$f(L) |l\rangle = f(l) |l\rangle. \quad (1.71a)$$

Например [1], если $f(L) = L^2$, то $L^2 |l\rangle = l^2 |l\rangle$. Однако мы постулируем, что соотношение (1.71a) справедливо даже тогда, когда функция $f(L)$ не может быть разложена в степенной ряд. Например, если мы рассмотрим функцию $f(L) = L^{-1}$, то тогда

$$L^{-1} |l\rangle = l^{-1} |l\rangle$$

при условии, что ни одно из собственных значений не обращается в нуль. А это и есть как раз условие существования оператора L . Другим простым примером может служить функция $f(L) = L^{1/2}$. В этом случае

$$L^{1/2} |l\rangle = \pm l^{1/2} |l\rangle$$

и появляется неопределенность в выборе знака перед $l^{1/2} |l\rangle$. Оператор $L^{1/2}$ существует, и его собственные значения вещественны, когда положительны собственные значения оператора L . Неопределенность же в знаке в приведенном выше равенстве может быть устранена выбором определенного знака для каждого собственного значения. Обычно выбирают положительное значение корня.

Наконец, выражение, эрмитовски сопряженное выражению (1.71a), должно иметь вид

$$\langle l | f^+(L) = f^*(l) \langle l | \quad (1.71b)$$

или для функции $G(L)$

$$\langle l | G(L) = G(l) \langle l |. \quad (1.71c)$$

1.8. Матрицы

В разделе 1.9 будут даны матричные представления кет- и бра-векторов и линейных операторов в кет- и бра-пространствах. Мы предполагаем, что читателю уже известны некоторые общие свойства конечных матриц, и поэтому в этом разделе мы приведем лишь несколько менее известных свойств таких матриц, а также попытаемся обобщить основные свойства конечных матриц на бесконечные матрицы.

След (или шпур) конечной квадратной матрицы определяется как сумма ее диагональных элементов. Таким образом, если A — конечная квадратная матрица, то

$$\text{Sp}(A) \equiv \sum_i A_{ii}, \quad (1.72)$$

где Sp — сокращенное от «Spur» — «след» и A_{ii} — диагональный элемент матрицы. Нетрудно доказать, что след произведения конечных квадратных матриц инвариантен относительно циклической перестановки перемножаемых матриц:

$$\text{Sp}(ABC) = \text{Sp}(BCA) = \text{Sp}(CAB). \quad (1.73)$$

Матрица A^+ , эрмитовски сопряженная матрице A , получается из матрицы A путем замены строк столбцами (и наоборот) и комплексным сопряжением каждого элемента. Если

$$A = A^+, \quad (1.74)$$

то говорят, что матрица A эрмитова, т. е.

$$(A^+)_{ij} = A_{ji}^* = A_{ij}.$$

Матрица A называется унитарной, если

$$AA^+ = A^+A = I, \text{ т. е. } A^+ = A^{-1}, \quad (1.75)$$

где матрица A^{-1} является матрицей, обратной матрице A . Обратная матрица существует только в том случае, если определитель прямой матрицы A отличен от нуля.

Эти и некоторые другие известные свойства конечных матриц могут быть использованы и для матриц с бесконечным числом строк и столбцов. Строки и столбцы могут

быть обозначены или дискретными индексами, или набором непрерывных индексов, лежащих в некотором интервале, или совокупностью тех и других. Например, если величины q и q' могут принимать любые значения от $-\infty$ до $+\infty$, то матричный элемент матрицы A можно записать в виде $A_{q; q'}$ или в эквивалентной форме $A(q; q')$. По аналогии с правилами умножения конечных матриц, если мы умножаем матрицу A с элементами $A_{q; q'}$ на другую матрицу B с элементами $B_{q; q'}$ (или $B(q; q')$), то можем написать

$$C_{q; q'} = \int_{-\infty}^{+\infty} A(q; q'') B(q''; q') dq''. \quad (1.76)$$

Если последний интеграл сходится, то все хорошо. Аналогичным образом, след матрицы A равен

$$\text{Sp}(A) = \int A(q'; q') dq'.$$

При этом также предполагается, что этот интеграл существует. Диагональная бесконечная матрица A записывается в виде

$$A(q'; q'') = A(q'; q') \delta(q' - q'').$$

Таким образом, приведенные выше соотношения обобщены на бесконечные матрицы.

1.9. Матричное представление кет- и бра-векторов и операторов

Ранее уже отмечалось, что различные представления соответствуют различным системам координат в обычном векторном анализе. В этом разделе мы определим более точный смысл этих интуитивных концепций. Мы покажем, каким образом определяется представление и как определяются операторы и собственные векторы в выбранном представлении. В частности, мы покажем, что произвольные кет- и бра-векторы в векторном пространстве могут быть представлены в виде матричных столбцов и строк, а сами операторы могут быть представлены в виде обычных квадратных матриц. Формула (1.37) является простым примером такого представления. Преимущество использования определенного представления при решении конкретных

задач квантовой механики аналогично преимуществу использования определенной системы координат в обычной геометрии.

Мы будем развивать теорию представлений одновременно на примере наблюдаемой величины L , имеющей дискретный спектр собственных значений, и наблюдаемой величины q , имеющей непрерывный спектр собственных значений.

Начнем это рассмотрение с анализа уравнений для собственных значений наблюдаемых величин L и q :

$$L |l\rangle = l |l\rangle, \quad q |q'\rangle = q' |q'\rangle, \quad (1.77)$$

где собственные значения l дискретны, а собственные значения q' непрерывны. В силу того, что величины L и q являются наблюдаемыми, собственные кет-векторы $\{|l\rangle\}$ и $\{|q'\rangle\}$ образуют полную систему собственных кет-векторов. Следовательно, эти собственные кет-векторы должны удовлетворять условиям ортонормировки (1.35) и (1.63):

$$\langle l' | l'' \rangle = \delta_{l'l''}, \quad \langle q' | q'' \rangle = \delta(q' - q''), \quad (1.78)$$

а в силу соотношений (1.49) и (1.67) они также удовлетворяют и соотношениям полноты

$$\sum_{l'} |l'\rangle \langle l'| = I, \quad \int |q'\rangle dq' \langle q'| = I. \quad (1.79)$$

В силу (1.79) произвольный кет-вектор $|\psi\rangle$ может быть записан в виде

$$|\psi\rangle = \sum_{l'} |l'\rangle \langle l' | \psi \rangle, \quad |\psi\rangle = \int |q'\rangle \langle q' | \psi \rangle dq'. \quad (1.80)$$

Аналогично, в обычном векторном пространстве, если векторы \mathbf{i} , \mathbf{j} , \mathbf{k} являются тремя единичными ортогональными векторами, то произвольный вектор \mathbf{A} может быть записан в форме

$$\mathbf{A} = A_x \mathbf{i} + A_y \mathbf{j} + A_z \mathbf{k}. \quad (1.81)$$

Это разложение аналогично разложению (1.80). Аналогом же соотношений ортонормировки (1.78) являются соотношения

$$(\mathbf{i} | \mathbf{j}) = (\mathbf{j} | \mathbf{k}) = \dots = 0, \quad (\mathbf{i} | \mathbf{i}) = (\mathbf{j} | \mathbf{j}) = (\mathbf{k} | \mathbf{k}) = 1.$$

Система векторов $\{i, j, k\}$ является полной системой, так как любой вектор A может быть разложен по этим векторам, как это, например, сделано в (1.81). В этом случае говорят, что вектор A раскладывается в представлении i, j, k .

Последние векторы могут рассматриваться как базисные векторы в этом пространстве.

Точно так же система векторов $\{|l\rangle\}$ (или $\{|q'\rangle\}$) может рассматриваться как заданная система ортогональных единичных базисных векторов в смысле (1.78), а тогда можно сказать, что соотношения (1.80) как раз и дают разложение кет-вектора $|\psi\rangle$ в L - (или q -) представлении. Числа $\langle l' | \psi \rangle$ (или $\langle q' | \psi \rangle$) являются проекциями, или, как их назвал Дирак, представителями вектора $|\psi\rangle$ в L - (или q -) представлении.

При представлении кет-вектора $|\psi\rangle$ мы можем в качестве базисных векторов выбрать другие собственные кет-векторы, отличные от собственных векторов для наблюдаемых величин L (или q). Это можно проделать точно так же, как вектор A можно разложить по другой системе базисных векторов, отличной от системы i, j, k . Этот вопрос мы обсудим в следующем разделе.

Из первоначального определения скалярного произведения (см. раздел 1.3) мы знаем, что величины $\langle l' | \psi \rangle$ (и $\langle q' | \psi \rangle$) могут рассматриваться как функции l' (или q'). Эти функции можно записать соответственно в виде $\psi_{l'}$ (или $\psi(q')$), ибо каждому значению l' (или q') соответствует число $\psi_{l'}$ (или $\psi(q')$). Эта совокупность чисел однозначно определяет вектор $|\psi\rangle$ (если точно указаны соответствующие собственные векторы) точно так же, как числа A_x, A_y и A_z однозначно определяют вектор A (если выбраны базисные векторы i, j, k).

Вектор A можно записать в виде некоторого матричного столбца:

$$A = \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \\ A_z \end{bmatrix} = A_x i + A_y j + A_z k, \quad (1.82)$$

где строки обозначены индексами x, y и z . Аналогичным образом, кет-вектор $|\psi\rangle$ в соотношении (1.80) можно записать в виде матрицы с одним столбцом, в которой

строки обозначаются символами l' (или q'):

$$|\psi\rangle = \sum_{l'} \langle l' | \psi \rangle |l'\rangle, \quad |\psi\rangle = \int dq' \langle q' | \psi \rangle |q'\rangle. \quad (1.83)$$

Существует, таким образом, способ представления произвольного кет-вектора в виде векторного столбца*). Число строк этого вектора определяется числом собственных значений, которые принимают l' (или q'). Как правило, представители $\langle l' | \psi \rangle$ (или $\langle q' | \psi \rangle$) являются комплексными функциями.

Соотношения (1.83) можно пояснить с помощью простого примера, приведенного нами в разделе 1.6. В силу соотношений (1.41) и (1.42) мы имеем следующее представление произвольного кет-вектора в кет-пространстве:

$$|P\rangle = \begin{bmatrix} \langle +1 | P \rangle \\ \langle -1 | P \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + c_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (1.84)$$

Из этих выражений видно, что сами базисные векторы могут быть представлены в виде некоторых матричных столбцов:

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle &= \begin{bmatrix} \langle + 1 | + 1 \rangle \\ \langle - 1 | + 1 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \\ | - 1 \rangle &= \begin{bmatrix} \langle + 1 | - 1 \rangle \\ \langle - 1 | - 1 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Еще раньше, во введении, мы уже указывали, что выражения $\langle q' | \psi \rangle = \psi(q')$ являются шредингеровскими волновыми функциями в координатном представлении, если q есть наблюдаемая величина, связанная с координатой частицы, движущейся в одном измерении. Все эти вопросы мы будем рассматривать более полно несколько позднее.

По аналогии с приведенными выше рассуждениями мы можем произвольный бра-вектор $\langle \psi |$ представить в виде матрицы с одной строчкой и со столбцами, обозначенными

*) Вообще говоря, представление чисел $\langle q' | \psi \rangle$ в случае непрерывной переменной q' с помощью некоторого векторного столбца не вполне логично и обосновано. В данном случае мы это делаем по аналогии со случаем дискретного набора чисел $\langle l' | \psi \rangle$.

символом l' (или q'):

$$\langle \psi | = \sum_{l'} \langle \psi | l' \rangle \langle l' |, \quad \langle \psi | = \int \langle \psi | q' \rangle dq' \langle q' |. \quad (1.86)$$

Согласно общему свойству (1.8) мы имеем

$$\langle \psi | l' \rangle = \langle l' | \psi \rangle^* \equiv \psi_{l'}^*, \quad (1.87)$$

$$\langle \psi | q' \rangle = \langle q' | \psi \rangle^* \equiv \psi^*(q').$$

Поэтому вектор, эрмитовски сопряженный матричному столбцу, является строчным вектором, в котором соответствующие элементы комплексно сопряжены элементам векторного столбца.

Далее мы рассмотрим вопрос о записи любого линейного оператора A в виде матрицы в L - (или q -) представлении. Для этого, применив дважды соотношения полноты (1.79), запишем оператор A в виде

$$A = \sum_{l', l''} | l' \rangle \langle l' | A | l'' \rangle \langle l'' |$$

или

$$A = \iint dq' dq'' | q' \rangle \langle q' | A | q'' \rangle \langle q'' |. \quad (1.88)$$

Числа $\langle l' | A | l'' \rangle$ (или $\langle q' | A | q'' \rangle$) являются функциями величин l' и l'' (или q' и q'') (см. определение линейного оператора, приведенное в разделе 1.4). Число $\langle l' | A | l'' \rangle$ мы можем записать в виде матрицы в L -представлении:

$$\langle l' | A | l'' \rangle \equiv A_{l'l''}, \quad (1.89)$$

а число $\langle q' | A | q'' \rangle$ — в виде матрицы в q -представлении (непрерывном):

$$\langle q' | A | q'' \rangle = A(q'; q''). \quad (1.90)$$

В частности, если $A = L$ (или q), то последние матричные элементы в силу соотношений (1.77) и (1.78) приводятся к следующим выражениям:

$$\langle l' | L | l'' \rangle = l' \delta_{l'l''}, \quad \langle q' | q | q'' \rangle = q' \delta(q' - q''), \quad (1.91)$$

так что величины L (или q) диагональны в собственном

представлении. Таким образом, соотношения (1.89) определяют оператор A в представлении, в котором матрица L диагональна, а соотношения (1.90) определяют оператор A в представлении, в котором диагональна матрица q . Если снова возвратиться к примеру из раздела 1.6, то увидим, что соотношение (1.37) является специальным случаем соотношения (1.91), т. е.

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} \langle +1 | \sigma_z | +1 \rangle & \langle +1 | \sigma_z | -1 \rangle \\ \langle -1 | \sigma_z | +1 \rangle & \langle -1 | \sigma_z | -1 \rangle \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (1.92)$$

и матрица $[\sigma_z]$ диагональна. Последнее представление называется σ_z -представлением.

Ранее уже несколько раз указывалось, что алгебра операторов совпадает с алгеброй матриц, и поэтому неудивительно, что операторы могут быть представлены матрицами. Аналогично этому алгебра кет- и бра-векторов оказывается той же самой, что и алгебра однострочных или однострочных матриц.

Мы ввели систему базисных векторов с помощью собственных векторов определенного оператора L (или q). Однако последнее совершенно не обязательно, ибо система базисных векторов может быть введена произвольным образом; при любом выборе базиса кет-векторы выражаются с помощью матричных столбцов, а операторы — с помощью квадратных матриц. При этом базисные векторы всегда выбираются ортонормированными в смысле (1.78). В следующем разделе мы покажем, каким образом происходит переход от одной системы базисных векторов к другой.

1.10. Функции преобразования. Изменение представления

Выбор наблюдаемой величины для определения базисных векторов, как правило, не является единственным. Для примера можно привести систему с частицей, движущейся в одном измерении, для которой подходящей наблюдаемой величиной для представления состояния векторов и операторов в матричной форме мог бы служить или импульс частицы p , или ее координата q . При вычислениях в некоторых случаях одно представление может оказаться более удобным, чем другое. В этом разделе мы рассмотрим,

как изменяются векторы состояний и операторы при замене одного представления другим. В следующем разделе мы подробно рассмотрим соответствующий пример.

Задача о переходе от одного представления к другому целиком аналогична задаче о повороте координатных осей в обычной геометрии. Покажем это на примере двумерного поворота. Пусть оси x и y составляют прямоугольную систему координат, а оси x' и y' — систему координат, повернутую относительно системы x, y против часовой стрелки на угол ϑ . Тогда мы имеем следующие уравнения преобразования осей координат:

$$x' = \cos \vartheta \cdot x + \sin \vartheta \cdot y, \quad y' = -\sin \vartheta \cdot x + \cos \vartheta \cdot y \quad (1.93)$$

или, в матричных обозначениях,

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \\ -\sin \vartheta & \cos \vartheta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}. \quad (1.94)$$

Детерминант матрицы преобразования

$$K = \begin{bmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta \\ -\sin \vartheta & \cos \vartheta \end{bmatrix} \quad (1.95)$$

равен единице, а произведение матрицы K на транспонированную матрицу \bar{K} равно единичной матрице:

$$K\bar{K} = \bar{K}K = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.96)$$

(транспонированной называется такая матрица, в которой строки и столбцы переставлены местами).

Из равенства (1.96) можно заключить, что

$$\bar{K} = K^{-1}, \quad (1.97)$$

где матрица K^{-1} является матрицей, обратной по отношению к матрице K .

Если $\bar{K} = K^{-1}$ и $\det K = 1$, то преобразование координат от x', y' к x, y является преобразованием вращения. Для того чтобы перейти к преобразованию, обратному преобразованию (1.94), мы воспользуемся соотношением (1.97) и в результате получим

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \bar{K} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix}. \quad (1.98)$$

Аналогично, компоненты произвольного вектора A в системе координат x', y' связаны с компонентами этого вектора в системе координат x, y , с помощью соотношения

$$\begin{bmatrix} A_{x'} \\ A_{y'} \end{bmatrix} = K \begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix} \quad (1.99)$$

или

$$\begin{bmatrix} A_x \\ A_y \end{bmatrix} = \tilde{K} \begin{bmatrix} A_{x'} \\ A_{y'} \end{bmatrix}. \quad (1.100)$$

Эти компоненты показаны на рис. 3.

Переход от одного представления к другому в кет, (или бра-) пространстве в принципе ничуть не сложнее-

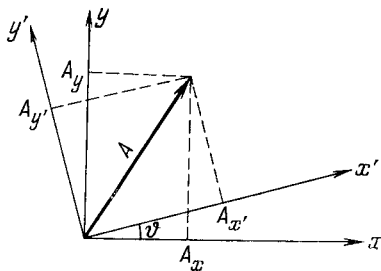


Рис. 3. Компоненты вектора в двух системах координат, повернутых относительно друг друга.

чем преобразование компонент вектора от одной системы координат к другой в приведенном выше примере. Предположим, что мы имеем две наблюдаемые величины L и M , которые удовлетворяют следующим уравнениям для собственных значений:

$$\begin{aligned} \langle l' | L = l' \langle l' |, \\ \langle m' | M = m' \langle m' |. \end{aligned} \quad (1.101)$$

Величины l' и m' одновременно могут пробегать или дискретный, или непрерывный ряд значений, либо набор величин l' имеет дискретный ряд значений, а набор m' — непрерывный (и наоборот). Возможна также ситуация, когда спектр величины l' или m' в некотором интервале дискретный, а в другом — непрерывный. Для простоты в этом разделе мы будем предполагать, что величины l' и m' пробегают дискретный ряд значений, хотя исследование вопроса о преобразовании представлений можно проводить аналогичным образом для любой из указанных выше возможностей. Для наблюдаемых L и M имеют место соотношения

$$\langle l' | l'' \rangle = \delta_{l'l''}, \quad \langle m' | m'' \rangle = \delta_{m'm''}, \quad (1.102)$$

и в силу полноты систем собственных векторов имеем

$$\sum_{l'} |l'\rangle \langle l'| = I, \quad \sum_{m'} |m'\rangle \langle m'| = I. \quad (1.103)$$

Следовательно, можно разложить любой бра-вектор $\langle l'|$ по системе собственных бра-векторов $\{|m'\rangle\}$ и, наоборот, любой бра-вектор $\langle m'|$ — по системе собственных бра-векторов $\{|l'\rangle\}$ и в силу (1.103) получить

$$\langle l'| = \sum_{m'} \langle l'|m'\rangle \langle m'|, \quad \langle m'| = \sum_{l'} \langle m'|l'\rangle \langle l'|. \quad (1.104)$$

Мы можем рассматривать числа

$$\langle l'|m'\rangle \equiv S_{l'm'} \quad (1.105)$$

как элементы матрицы со строками, обозначенными символом l' , и столбцами, обозначенными символом m' . Эти числа образуют функцию преобразования, а соответствующая им матрица S называется матрицей преобразования, ибо числа $S_{l'm'}$ делают возможным переход от представления, в котором диагональна матрица оператора, соответствующего величине M , к представлению, в котором диагональна матрица оператора, соответствующего величине L . Числа $S_{l'm'}$ играют роль элементов матрицы K в выражении (1.95). В силу (1.8) и (1.105) получаем, что

$$S_{l'm'} \equiv \langle l'|m'\rangle = \langle m'|l'\rangle^* = S_{m'l'}^*. \quad (1.106)$$

Если имеется произвольный кет-вектор $|\psi\rangle$, то мы можем образовать скалярное произведение этого вектора на векторы (1.104) и получить

$$\langle l'|\psi\rangle = \sum_{m'} S_{l'm'} \langle m'|\psi\rangle, \quad \langle m'|\psi\rangle = \sum_{l'} S_{m'l'} \langle l'|\psi\rangle. \quad (1.107)$$

Согласно предыдущему разделу величина $\langle l'|\psi\rangle$ является представителем кет-вектора $|\psi\rangle$ в L -представлении, а величина $\langle m'|\psi\rangle$ — представителем $|\psi\rangle$ в M -представлении. В предыдущем разделе эти величины изображались в виде матричных столбцов, так что мы видим, что соотношения (1.107) являются полными аналогами соотношений

(1.99) и (1.100). В случае поворота системы координат в обычном векторном пространстве матрица преобразования удовлетворяет условиям $K = K^{-1}$ и $\det K = 1$. Теперь покажем, что матрица S преобразования кет-векторов из одного представления в другое удовлетворяет условиям

$$S^+S = SS^+ = I, \quad (1.108)$$

так что

$$S^{-1} = S^+. \quad (1.109)$$

Иными словами, покажем, что преобразование от M -представления к L -представлению является скорее унитарным преобразованием, чем преобразованием чистого поворота. Для этого мы напишем (используя определение матричного элемента произведения двух матриц)

$$\langle m'' | S^+S | m' \rangle = \sum_{l'} \langle m'' | l' \rangle \langle l' | m' \rangle = \delta_{m'm''}, \quad (1.110)$$

$$\langle l'' | SS^+ | l' \rangle = \sum_{m'} \langle l'' | m' \rangle \langle m' | l' \rangle = \delta_{l'l''}.$$

При этом были использованы соотношения полноты (1.103) и ортонормировки (1.102). Таким образом, матрица S унитарна. Если матричные элементы матрицы $S_{l'm'}$ были бы вещественными, то $S^+ = \tilde{S}$, а тогда соотношение (1.109) означало бы, что преобразование от L -представления к M -представлению является чистым поворотом (сравните с равенством (1.97)). На самом деле преобразование, определяемое матрицей S в комплексном бра-(или кет-) пространстве, является лишь аналогом поворота.

В итоге можно сказать, что функция преобразования $S = (\langle l' | m' \rangle)$ необходима для того, чтобы определять компоненты произвольного кет-вектора $|\psi\rangle$ в $(|l'\rangle)$ -представлении по известным компонентам этого вектора в $(|m'\rangle)$ -представлении и наоборот. Отметим также, что совокупность чисел $\langle l' | \psi \rangle$ является функцией $\psi(l')$ величины l' , т. е. $\langle l' | \psi \rangle = \psi(l')$ (см. определение скалярного произведения в разделе 1.3), а совокупность чисел $\langle m' | \psi \rangle$ является другой функцией $\psi(m')$ от величины m' , т. е. $\langle m' | \psi \rangle = \psi(m')$. Несколько позднее мы будем рассмат-

ривать эти функции как волновые функции в двух различных представлениях.

Перейдем теперь к преобразованию операторов при переходе от одного представления к другому. Рассмотрим для этого матричные элементы, представляющие оператор A в L -представлении, $\langle l' | A | l'' \rangle = A_{l'l''}$. Если мы дважды используем соотношение полноты (1.103) для вектора $|m'\rangle$, то получим

$$\langle l' | A | l'' \rangle = \sum_{m', m''} \langle l' | m' \rangle \langle m' | A | m'' \rangle \langle m'' | l'' \rangle. \quad (1.111)$$

Здесь величины $A_{m'm''} = \langle m' | A | m'' \rangle$ являются матричными элементами (или представителями) оператора A в M -представлении. Если мы используем соотношения (1.105) и (1.106), то выражение (1.111) запишется в виде

$$A_{l'l''} = \sum_{m'm''} S_{l'm'} A_{m'm''} S_{l''m''}^* \quad (1.112)$$

или в виде матриц

$$A_L = S A_M S^+ = S A_M S^{-1}. \quad (1.113)$$

В этом случае, когда операторы преобразуются по формуле (1.113), говорят, что они подвергаются преобразованию подобия. Если теперь обе части равенства (1.113) умножить слева на S^{-1} , а справа на S , то с помощью выражения (1.108) можно получить

$$A_M = S^{-1} A_L S = S^+ A_L S. \quad (1.114)$$

Отсюда можно сделать вывод, что когда кет- (или бра-) векторы подвергаются унитарному преобразованию, операторы в кет- (или бра-) пространстве претерпевают преобразование подобия.

Мы разработали законченную схему для преобразования векторов и операторов в кет- (или бра-) пространстве при переходе от одного представления в этом пространстве к другому. В следующем разделе мы поясним эту схему на простом примере.

1.11. Квантование. Пример непрерывного спектра

Когда производится однократное измерение некоторой наблюдаемой величины, то в результате этого измерения получается одно из собственных значений этой величины. Поэтому для того, чтобы связать теорию с экспериментом, весьма важно уметь решать задачи на собственные значения. До настоящего момента мы решили только одну такую задачу в разделе 1.6, где оператор наблюдаемой величины удовлетворял алгебраическому уравнению $\sigma_z^2 = I$. В этом случае гильбертово пространство состояло только из двух собственных векторов и спектр собственных значений имел только два дискретных значения: $+1$ и -1 . В данном разделе мы решим еще одну такую задачу на собственные значения, спектр которых является непрерывным. В этом простом примере будет рассматриваться такая квантовомеханическая система, которая имеет классический аналог.

Рассмотрим снова частицу массы m , движущуюся в одном измерении в поле внешних сил. В классической механике эта система может быть полностью описана путем задания координаты и импульса частицы в каждой точке пространства и в каждый момент времени. Если мы точно определим координату и импульс частицы в определенный момент времени, то мы точно определим классическое состояние этой системы в данный момент времени.

При рассмотрении этой системы с точки зрения квантовой механики мы, согласно развитым нами представлениям, связываем с каждой из динамических переменных (в силу того, что они являются наблюдаемыми величинами) некоторый линейный эрмитов оператор; для координаты и импульса частицы будем обозначать эрмитовы операторы соответственно q и p . Эти операторы, как операторы наблюдаемых величин, удовлетворяют условию

$$p = p^+, \quad q = q^+. \quad (1.115)$$

Классический гамильтониан системы H также является наблюдаемой величиной, и поэтому ему соответствует в квантовой механике эрмитов оператор:

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(q) = H^+, \quad (1.116)$$

который выражается через операторы p и q .

После перечисления всех операторов, необходимых для описания физической системы, следует установить вид алгебры, которой подчиняются эти операторы. Установление вида алгебры требует введения в теорию дополнительного постулата в виде коммутационных соотношений, которым подчиняются соответствующие операторы. Для операторов p и q эти соотношения постулируются в виде

$$\begin{aligned} [q, q] &= 0, \quad [p, p] = 0, \\ [q, p] &= (qp - pq) = i\hbar \end{aligned} \quad (1.117)$$

(\hbar — постоянная Планка, деленная на 2π). Так как в классике величины q и p коммутируют, то квантовая и классическая системы отличаются друг от друга соотношениями коммутации для этих величин. Отсюда следует, что когда операторы наблюдаемых величин q и p удовлетворяют соотношениям коммутации (1.117), соответствующая классическая система «квантуется».

Оправданием для введения квантового постулата в виде соотношений коммутации типа (1.117) является замечательное согласие между теорией и экспериментом. Повидимому, указанный выше постулат является наиболее глубоким и фундаментальным постулатом теории.

Классическая механика содержится в квантовой механике в виде предельного случая при $\hbar \rightarrow 0$, ибо при этом величины q и p коммутируют. Это утверждение называется принципом соответствия.

В том случае, когда операторы q и p подчиняются условиям (1.117), говорят, что они подчиняются некоммутативной алгебре.

Прежде чем переходить к дальнейшему изложению теории, выведем несколько полезных соотношений для некоммутирующих операторов. Если l — целое число, то из соотношений (1.117) с помощью математической индукции следует, что

$$\begin{aligned} [q, p^l] &= i\hbar l p^{l-1} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial p} p^l, \\ [p, q^l] &= -i\hbar l q^{l-1} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} q^l \end{aligned} \quad (1.118)$$

(см. задачу 1.1 в конце главы).

Отсюда видно, что если $F(p)$ и $G(q)$ являются функциями, которые могут быть разложены в степенные ряды соответственно по p и q , то тогда

$$[q, F(p)] \equiv i\hbar \frac{\partial F}{\partial p}, \quad (1.119a)$$

$$[p, G(q)] \equiv -i\hbar \frac{\partial G}{\partial q}. \quad (1.119b)$$

Мы постулируем, что эти соотношения справедливы даже в том случае, когда функции F и G не могут быть разложены в степенные ряды.

Если идти еще дальше, то можно обобщить все эти коммутационные соотношения и на тот случай, когда функция F является функцией операторов p и q одновременно, т. е. $F(p, q)$. Тогда получим*)

$$[q, F(p, q)] \equiv i\hbar \frac{\partial F}{\partial p}, \quad (1.120a)$$

$$[p, F(p, q)] \equiv -i\hbar \frac{\partial F}{\partial q}. \quad (1.120b)$$

При использовании соотношений (1.120) нужно быть крайне осторожным, ибо величины p и q не коммутируют друг с другом. Например, если $F(p, q) = pqr$, то это не значит, что $F(p, q) = p^2q$. Применение в данном случае соотношений (1.120) дает

$$[q, pqr] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} pqr = i\hbar (pq + qr).$$

Другими словами, при использовании соотношений (1.120) всегда должен сохраняться порядок сомножителей в функции $F(p, q)$.

*) Производные в формулах (1.118) — (1.120b) более строго определяются следующим образом:

$$\frac{\partial F(p, q)}{\partial p} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} F(p + \varepsilon, q),$$

где ε — число, т. е. ε коммутирует с p и q . Этот вопрос более детально обсуждается в гл. III.

Теперь мы вполне подготовлены к тому, чтобы решить две задачи на собственные значения*)

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle, \quad q|q'\rangle = q'|q'\rangle \quad (1.121)$$

для импульса p и координаты q . Необходимо найти собственные значения и собственные векторы соответствующих операторов. Для решения этих задач мы введем два оператора Дирака, называемые операторами сдвига. Происхождение их названия станет ясно позднее.

Рассмотрим оператор [2]

$$Q(\xi) = \exp\left(-\frac{i\xi p}{\hbar}\right), \quad (1.122)$$

где ξ — произвольный параметр. В силу эрмитовости оператора p

$$Q^+(\xi) = \exp\left(\frac{i\xi p}{\hbar}\right) = Q^{-1}(\xi), \quad (1.123)$$

так что если параметр ξ веществен, то оператор Q унитарен. Если мы используем теперь соотношение (1.119а), то получим

$$[q, Q] = i\hbar \frac{\partial Q}{\partial p} = \xi Q,$$

откуда следует:

$$qQ = Qq + \xi Q. \quad (1.124)$$

Теперь, если мы умножим обе стороны этого равенства справа на собственный кет-вектор оператора q с собственным значением q' , то с помощью уравнений (1.121) получим

$$q \{Q|q'\rangle\} = (q' + \xi) \{Q|q'\rangle\}. \quad (1.125)$$

Это уравнение говорит о том, что если вектор $|q'\rangle$ является собственным кет-вектором оператора q с собственным значением q' , то вектор $Q|q'\rangle$ также является собственным кет-вектором того же оператора q , но с собственным значением $q' + \xi$. Однако в силу теоремы 1 раздела 1.6 все собственные значения оператора q должны быть веще-

*) В дальнейшем в этой главе собственные значения обозначаются штрихами и являются обычными числами, а соответствующие им операторы не имеют штрихов. (Прим. перев.)

ственны, так как оператор q эрмитов. Поэтому число ξ является вещественным числом, что уже и было предположено при выводе равенства (1.123); в остальном это число пока совершенно произвольно. Это значит, что собственное значение $q' + \xi$ может принимать любое значение от $-\infty$ до $+\infty$. Иными словами, это означает, что собственные значения q' оператора q образуют непрерывный спектр.

Высказанные выше соображения, а также соотношение (1.125) оправдывают название оператора Q как оператора сдвига, ибо действие этого оператора на состояние $|q'\rangle$ с собственным значением q' переводит последнее в состояние с собственным значением $q' + \xi$. Если мы умножим обе части равенства (1.124) слева на оператор Q^{-1} , то получим равенство

$$Q^{-1} q Q = q + \xi, \quad (1.126)$$

которое показывает, что оператор Q смещает оператор q на величину ξ .

Норма вектора $Q|q'\rangle$ в силу условия (1.123) равна

$$\langle q'|Q^+Q|q'\rangle = \langle q'|q'\rangle, \quad (1.127)$$

так что вектор $Q|q'\rangle$ может быть равен нулю только в том случае, если вектор $|q'\rangle = 0$. Этот случай тривиален.

В силу непрерывности чисел q' мы можем нормировать собственные кет-векторы таким образом, чтобы они удовлетворяли соотношению ортонормировки (1.78):

$$\langle q'|q''\rangle = \delta(q' - q''), \quad (1.128)$$

а так как величина q , кроме того, является наблюдаемой величиной, то имеет место соотношение полноты (1.79):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q'\rangle dq' \langle q'| = I. \quad (1.129)$$

Таким образом, мы показали, что вектор $Q(\xi)|q'\rangle$ является собственным кет-вектором оператора наблюдаемой величины q с собственным значением $q' + \xi$. Это значит, что

$$Q(\xi)|q'\rangle = c|q' + \xi\rangle,$$

где c — постоянная, которая может зависеть как от q' , так и от ξ . Однако мы знаем, что

$$\langle q' | Q^+ Q | q'' \rangle = c^* (q', \xi) c (q'', \xi) \langle q' | q'' \rangle.$$

В этом равенстве в силу соотношений (1.128) и (1.123) обе стороны обращаются в нуль, если $q' \neq q''$. Отсюда мы заключаем, что когда $q' = q''$, то $|c(q', \xi)|^2 = 1$, т. е. абсолютное значение постоянной c равно единице. Однако постоянная c может зависеть еще от произвольной фазы, не имеющей физического смысла. Мы выберем эту фазу так, чтобы $c = 1$. Тогда

$$\exp\left(-\frac{i\xi p}{\hbar}\right) |q'\rangle = Q(\xi) |q'\rangle = |q' + \xi\rangle. \quad (1.130)$$

В частности, если мы положим в последнем равенстве $q' = 0$, то получим

$$Q(\xi) |0\rangle_q = |\xi\rangle,$$

где индекс q показывает, что вектор $|0\rangle_q$ является собственным кет-вектором оператора q с собственным значением, равным нулю. Если мы теперь в последнем соотношении положим число $\xi = q'$, то соотношение примет вид

$$\exp\left(-\frac{iq'p}{\hbar}\right) |0\rangle_q = Q(q') |0\rangle_q = |q'\rangle. \quad (1.131)$$

Мы видим, что состояние с собственным значением q' может быть получено из состояния с собственным значением $q' = 0$ с помощью оператора сдвига $Q(q')$.

Легко найти выражение, комплексно сопряженное выражению (1.130):

$$\langle q' | Q^+(\xi) = \langle q' | \exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right) = \langle q' + \xi |, \quad (1.132)$$

откуда

$${}_q\langle 0 | Q^+(q') = \langle q' |. \quad (1.133)$$

Таким образом, все собственные кет-векторы (или собственные бра-векторы) могут быть получены из одного собственного кет-вектора (или собственного бра-вектора). Этого вполне достаточно для определения всех свойств собственных кет- (или бра-) векторов, необходимых для построения теории.

Введем теперь другой унитарный оператор сдвига:

$$P(\xi) = \exp\left(\frac{i\xi q}{\hbar}\right). \quad (1.134)$$

Нетрудно показать, что собственные значения оператора импульса p могут принимать любые значения от $-\infty$ до $+\infty$. Кроме того, можно показать, что

$$P(\xi)|p'\rangle = |p' + \xi\rangle, \quad (1.135)$$

$$P(p')|0\rangle_p \equiv \exp\left(\frac{ip'q}{\hbar}\right)|0\rangle_p = |p'\rangle \quad (1.136)$$

или

$${}_p\langle 0|P^\dagger(p') = {}_p\langle 0|\exp\left(\frac{-ip'q}{\hbar}\right) = \langle p'|. \quad (1.137)$$

Аналогично (1.126), имеем

$$P^{-1}pP = p + \xi. \quad (1.138)$$

Собственные кет-векторы $|p'\rangle$ оператора наблюдаемой величины p удовлетворяют соотношениям ортонормировки и полноты:

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p' - p''), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |p'\rangle dp' \langle p'| = I. \quad (1.139)$$

Таким образом, мы решили задачу на собственные значения как для оператора q , так и для оператора p . Обе совокупности кет-векторов $|q'\rangle$ и $|p'\rangle$ являются полными и ортонормированными системами, и поэтому любая из этих систем собственных кет-векторов может быть использована в качестве системы базисных векторов для представления любого состояния системы в кет-пространстве.

Как ясно из предыдущего раздела, для того чтобы перейти от одного представления к другому, необходимо знать функцию преобразования вида

$$S(p', q') = \langle p'|q'\rangle = \langle q'|p'\rangle^*. \quad (1.140)$$

В данном случае эта функция может быть очень просто вычислена с помощью операторов сдвига Q и P . В силу (1.131) имеем

$$\langle p'|q'\rangle = \langle p'|\exp\left(-\frac{iq'p}{\hbar}\right)|0\rangle_q, \quad (1.141)$$

но согласно (1.71)

$$\langle p' | F(p) = F(p') \langle p' |, \quad (1.142)$$

так что

$$\langle p' | q' \rangle = \exp\left(-\frac{iq'p'}{\hbar}\right) \langle p' | 0 \rangle_q. \quad (1.143)$$

Благодаря соотношению (1.137) и тому, что (см. формулу (1.71))

$$F(q)|q'\rangle = F(q')|q'\rangle, \quad (1.144)$$

соотношение (1.143) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \langle p' | q' \rangle &= \exp\left(-\frac{iq'p'}{\hbar}\right)_p \langle 0 | \exp\left(-\frac{ip'q}{\hbar}\right) | 0 \rangle_q = \\ &= \exp\left(-\frac{iq'p'}{\hbar}\right)_p \langle 0 | 0 \rangle_q \equiv \langle q' | p' \rangle^*. \end{aligned} \quad (1.145)$$

Но величина ${}_p\langle 0 | 0 \rangle_q$ есть постоянная, которую можно найти следующим образом: с помощью соотношений ортонормировки для векторов $|p'\rangle$ (см. (1.139)) и соотношений полноты для векторов $|q'\rangle$ (см. (1.129)) можно получить

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle p' | q' \rangle dq' \langle q' | p'' \rangle = \delta(p' - p''). \quad (1.146)$$

Если выражение (1.145) подставить в последнее соотношение, то найдем, что

$$|{}_p\langle 0 | 0 \rangle_q|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{iq'(p'' - p')}{\hbar}\right] dq' = \delta(p' - p'').$$

При соответствующем изменении обозначений с помощью (1.60b) находим, что интеграл в последнем соотношении равен $2\pi\hbar\delta(p' - p'')$, так что постоянная $|{}_p\langle 0 | 0 \rangle_q|^2$ оказывается равной

$$|{}_p\langle 0 | 0 \rangle_q|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}. \quad (1.147)$$

Фазу величины ${}_p\langle 0 | 0 \rangle_q$ можно выбрать так, чтобы

$$S(p', q') = \langle p' | q' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{ip'q'}{\hbar}\right) = \langle q' | p' \rangle^*. \quad (1.148)$$

Мы получили в явном виде функцию преобразования, которая рассматривалась в разделе 1.10.

В предыдущем разделе было показано, что оператор преобразуется из одного представления в другое с помощью соотношения (1.111). Для того чтобы применить эту формулу к оператору A в p - или q -представлении, будем считать, что операторам L и M с собственными значениями l' (или l'') и m' (или m'') соответствуют операторы q и p с собственными значениями q' (или q'') и p' (или p''). Так как в данном случае собственные значения операторов q и p непрерывны, то суммирование в (1.111) нужно заменить интегрированием. В результате получим

$$\langle q' | A | q'' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp' dp'' \langle q' | p' \rangle \langle p' | A | p'' \rangle \langle p'' | q'' \rangle.$$

Если теперь воспользоваться соотношением (1.148), то последнее выражение можно преобразовать к виду

$$\langle q' | A | q'' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' dp'' \exp \left[\frac{i(p'q' - p''q'')}{\hbar} \right] \langle p' | A | p'' \rangle. \quad (1.149)$$

Рассмотрим теперь конкретный случай $A = p$. В силу условий (1.139) и (1.121) имеем

$$\langle p' | p | p'' \rangle = p' \delta(p' - p''). \quad (1.150)$$

Если подставить формулу (1.150) в соотношение (1.149) и использовать для вычисления интеграла по p'' выражение (1.57), то нетрудно получить

$$\begin{aligned} \langle q' | p | q'' \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' p' \exp \left[\frac{ip'(q' - q'')}{\hbar} \right] = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{ip'(q' - q'')}{\hbar} \right] dp' = \\ &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{ip'(q' - q'')}{\hbar} \right] dp'. \quad (1.151) \end{aligned}$$

Предполагается, что интегралы по q' и q'' можно дифференцировать под знаком интеграла.

Благодаря условию (1.60b) последнее выражение можно записать в виде

$$\langle q' | p | q'' \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \delta(q' - q'') = - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''} \delta(q' - q''). \quad (1.152)$$

Однако в силу соотношения (1.128) равенство (1.152) может быть записано также в другом виде:

$$\langle q' | p | q'' \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'} \langle q' | q'' \rangle = - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q''} \langle q' | q'' \rangle. \quad (1.153)$$

Эта формула показывает, каким образом преобразуется оператор p при переходе из p -представления к q -представлению.

Этот результат можно легко обобщить на случай функции F от оператора p . В этом случае соотношение (1.153) заменяется следующим:

$$\langle q' | F(p) | q'' \rangle = F\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'}\right) \langle q' | q'' \rangle. \quad (1.154)$$

Если рассматривается произвольная функция V от оператора q , то в силу соотношения (1.144) имеем

$$\langle q' | V(q) | q'' \rangle = V(q') \langle q' | q'' \rangle. \quad (1.155)$$

Совершенно аналогично можно показать, каким образом преобразуется оператор q при переходе к p -представлению. В этом случае имеет место формула, аналогичная формуле (1.153):

$$\langle p' | q | p'' \rangle = - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | p'' \rangle = + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p''} \langle p' | p'' \rangle. \quad (1.156)$$

В качестве другого примера применения приведенной выше теории покажем, каким образом связаны между собой представители произвольного вектора состояния $|\psi\rangle$ в двух различных представлениях. Эта связь определяется соотношением (1.107). Положив, как и раньше, $L = q$ и $M = p$, в силу непрерывности спектра собственных значений операторов p и q мы должны в формуле (1.107) заменить суммирование интегрированием. Тогда получим

выражения

$$\begin{aligned}\psi(q') &\equiv \langle q' | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q' | p' \rangle dp' \langle p' | \psi \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \exp\left(\frac{ip'q'}{\hbar}\right) \langle p' | \psi \rangle, \quad (1.157)\end{aligned}$$

$$\varphi(p') \equiv \langle p' | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \exp\left(-\frac{ip'q'}{\hbar}\right) \langle q' | \psi \rangle, \quad (1.158)$$

в которых мы использовали функцию преобразования (1.148). Мы знаем, что величины $\langle q' | \psi \rangle = \psi(q')$ и $\langle p' | \psi \rangle = \varphi(p')$ являются функциями соответственно q' и p' . Из соотношений (1.157) и (1.158) следует, что функции $\psi(q')$ и $\varphi(p')$ связаны преобразованием Фурье. В соответствии с приведенными ранее основными положениями функции $\psi(q')$ и $\varphi(p')$ изображают один и тот же вектор состояния $|\psi\rangle$ в двух различных представлениях. Эти функции называются также шредингеровскими волновыми функциями.

Соотношения (1.154) и (1.155) можно обобщить следующим образом: умножим (1.154) справа на $\langle q'' | \psi \rangle$ и проинтегрируем по q'' от $-\infty$ до $+\infty$. Если мы используем к тому же соотношение полноты, то равенство (1.154) преведется к виду

$$\langle q' | F(p) | \psi \rangle = F\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'}\right) \langle q' | \psi \rangle = F\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'}\right) \psi(q'), \quad (1.159)$$

где кет-вектор $|\psi\rangle$ является произвольным вектором состояния. Аналогичная процедура, примененная к соотношению (1.155), показывает, что

$$\langle q' | V(q) | \psi \rangle = V(q') \langle q' | \psi \rangle = V(q') \psi(q'). \quad (1.160)$$

Полученные формулы будут весьма полезными в дальнейшем.

Для рассматриваемой нами системы, состоящей из частицы, движущейся в одном измерении, существует еще одна важная наблюдаемая величина: гамильтониан системы, собственные значения которого мы еще не знаем. Эта наблюдаемая удовлетворяет следующему уравнению для

собственных значений:

$$H|E\rangle = E|E\rangle = \left[\frac{p^2}{2m} + V(q) \right] |E\rangle. \quad (1.161)$$

Очевидно, что до тех пор, пока мы не укажем явный вид функции $V(q)$, мы не в состоянии решить такую задачу на собственные значения. Заметим, что собственные векторы и собственные значения наблюдаемых величин p и q не зависят от вида потенциала $V(q)$. Вторая глава данной книги будет посвящена как раз исследованию уравнения (1.161) в случае, когда $V(q) = \frac{1}{2} kq^2$, где k — постоянная. Этот потенциал соответствует гармоническому осциллятору. Более простым примером является случай свободной частицы, когда $V(q) = 0$. В этом случае задача о собственных значениях оператора H крайне проста, но мы отложим ее решение до раздела 1.19.

Мы можем сформулировать задачу на собственные значения энергии в формуле (1.161) в координатном представлении. (Собственные кет-векторы $|E\rangle$ задают энергетическое представление.) Для этого умножим обе части равенства (1.161) на собственный бра-вектор величины q , т. е. на $\langle q'|$. Тогда

$$\langle q' | \left[\frac{p^2}{2m} + V(q) \right] |E\rangle = E \langle q' | E\rangle.$$

Если теперь воспользоваться соотношениями (1.159) и (1.160), в которых положить $|\psi\rangle = |E\rangle$ (ибо кет-вектор в этих соотношениях был произволен), то последнее уравнение можно написать в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq'^2} + V(q') \right] \langle q' | E\rangle = E \langle q' | E\rangle. \quad (1.162)$$

Решение этого уравнения определяет функцию преобразования $\langle q' | E\rangle$ от энергетического к координатному представлению. Эта функция является также собственной функцией энергии H в q -представлении или собственной функцией координаты q в энергетическом представлении. Уравнение (1.162) называется волновым уравнением Шредингера, не зависящим от времени. Функция $\langle q' | E\rangle$ является шредингеровской волновой функцией, которая

записывается в виде

$$\psi_E(q') \equiv \langle q' | E \rangle.$$

Уравнение (1.162) выведено на основе сформулированных нами постулатов, без привлечения дополнительных постулатов. Весь проведенный нами анализ предполагает, что мы рассматриваем систему в некоторый определенный момент времени. Для того чтобы указать, каким образом система развивается во времени в отсутствие возмущений, нам потребуется еще один постулат в теории (см. по этому поводу раздел 1.14).

Поскольку гамильтониан системы также является наблюдаемой величиной, то мы можем заключить, что собственные кет-векторы $|E\rangle$ будут образовывать полную систему и будут удовлетворять условиям ортонормировки. До того, как мы определим явный вид потенциала $V(q)$, мы не можем сказать, будут ли собственные значения гамильтониана дискретными, непрерывными или теми и другими в различных областях спектра и будет ли иметь место какое-либо вырождение системы. Прежде чем переходить к решению уравнения (1.162) для какого-либо конкретного потенциала $V(q')$, мы перейдем к физической интерпретации тех состояний системы, которые не являются собственными состояниями наблюдаемой величины. Рассмотрение таких состояний потребует включения в теорию вероятностной интерпретации, о которой уже упоминалось во введении.

1.12. Измерение наблюдаемых величин. Вероятностная интерпретация

В предыдущих разделах была дана физическая интерпретация собственных состояний наблюдаемых величин. Предполагалось, что если система находится в собственном состоянии $|l\rangle$ наблюдаемой величины L , то при измерении величины L с определенностью будет получаться значение l . Предполагалось также, что если над системой, находящейся в произвольном состоянии $|\psi\rangle$, производится однократное измерение величины L , то в результате получится одно из собственных значений этой величины. При этом вызываемое измерением возмущение будет заставлять систему «перескакивать» неконтролируемым образом в одно

из ее собственных состояний. Так как возмущение, вызываемое взаимодействием физической системы с устройством, используемым для наблюдения, будет нарушать ту причинную связь между измеряемой величиной и состоянием системы, которая имела место до измерения, то мы не можем точно предсказать, какое из собственных значений будет получено в результате такого измерения. Поэтому мы введем еще одно предположение, которое позволяет найти некоторую вероятность получения определенного собственного значения величины L в процессе измерения, производимого над системой, находящейся в произвольном состоянии $|\psi\rangle$.

Мы будем предполагать, что если наблюдаемая величина L измеряется бесконечное число раз (в действительности — большое число раз) для системы, которая каждый раз при измерении находится в одном и том же состоянии $|\psi\rangle$, и результаты измерений усредняются, то получаемое нами среднее значение $\langle L \rangle$ величины L равно

$$\langle L \rangle = \frac{\langle \psi | L | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (1.163)$$

Предположение (1.163) можно обобщить на случай, когда нужно определить среднее значение некоторой функции f наблюдаемой величины L . Соответствующая формула принимает вид

$$\langle f(L) \rangle = \frac{\langle \psi | f(L) | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (1.164)$$

Квантовые средние значения соответствующих величин, приведенные в формулах (1.163) и (1.164), являются некоторыми ансамблями средних значений, т. е. предполагается, что существует бесконечное число тождественных невзаимодействующих квантовых систем, которые приготовлены одинаковым образом. Каждая такая система называется элементом ансамбля. Величины L или $f(L)$ измеряются на каждом элементе ансамбля, и полученные результаты измерений усредняются. Средние значения при этом определяются по формулам (1.163) и (1.164). Необходимо все время помнить, что квантовое среднее является средним по ансамблю элементов, каждый из которых находится в состоянии $|\psi\rangle$.

Если собственные кет-векторы $|l\rangle$ наблюдаемой величины L образуют полную ортонормированную систему, то в случае дискретного спектра имеем

$$I = \sum_l |l\rangle \langle l|.$$

Если умножить обе стороны этого равенства на $f(L)$ слева, то получим

$$f(L) = \sum_l f(l) |l\rangle \langle l|. \quad (1.165)$$

Если мы при этом выберем такую функцию $f(L)$, что $f(l) = \delta_{ll'}$, то последнее равенство будет приведено к виду

$$f(L) = |l'\rangle \langle l'|. \quad (1.166)$$

Уравнение (1.45) является как раз примером разложения вида (1.165).

Согласно соотношению (1.164) среднее значение функции $f(L)$, определенной в (1.166), равно вероятности $P_{l'}$ найти значение l' величины L при проведении измерения над системой, находящейся в состоянии $|\psi\rangle$. Поэтому благодаря соотношениям (1.166) и (1.8) имеем

$$P_{l'} = \langle \psi | f(L) | \psi \rangle = \langle \psi | l' \rangle \langle l' | \psi \rangle = |\langle l' | \psi \rangle|^2, \quad (1.167)$$

где предполагается, что $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Волновая функция $\langle l' | \psi \rangle = \psi(l')$ в L -представлении называется амплитудой вероятности, а величина $|\psi(l')|^2$ равна вероятности получения величины l' при однократном измерении величины L , производимом над системой, находящейся в произвольном состоянии $|\psi\rangle$.

Рассмотрим теперь по аналогии с приведенным выше примером случай, когда $L = q$. Этот оператор имеет непрерывный спектр собственных значений от $-\infty$ до $+\infty$. Так как $q|q'\rangle = q'|q'\rangle$ и

$$\langle q' | q'' \rangle = \delta(q' - q''), \quad (1.168a)$$

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |q''\rangle dq'' \langle q''|, \quad (1.168b)$$

то последнее равенство можно умножить слева на оператор $f(q)$ и получить выражение

$$f(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(q'') |q''\rangle dq'' \langle q''|, \quad (1.169)$$

аналогичное соотношению (1.165). В частности, определим функцию $f(q'')$ следующим образом:

$$\begin{aligned} f(q'') &= 1, \text{ если } q' < q'' < q' + dq', \\ f(q'') &= 0 \text{ в остальных случаях.} \end{aligned} \quad (1.170)$$

Тогда оператор $f(q)$ имеет вид

$$f(q) = \int_{q'}^{q'+dq'} |q''\rangle dq'' \langle q''|. \quad (1.171)$$

Вероятность $P_{q'} dq'$ того, что при измерении наблюдаемой величины q для системы, находящейся в состоянии $|\psi\rangle$, будут получаться собственные значения между q' и $q' + dq'$, равна среднему значению функции $f(q)$, приведенной в соотношении (1.171),

$$\begin{aligned} P_{q'} dq' &= \langle \psi | f(q) | \psi \rangle = \int_{q'}^{q'+dq'} \langle \psi | q'' \rangle dq'' \langle q'' | \psi \rangle = \\ &= |\langle q' | \psi \rangle|^2 dq'. \end{aligned} \quad (1.172)$$

И в этом случае волновая функция $\langle q' | \psi \rangle = \psi(q')$ в q -представлении есть амплитуда вероятности, а величина $|\psi(q')|^2 dq'$ есть вероятность того, что измерение величины q , когда система находится в состоянии $|\psi\rangle$, даст собственное значение, заключенное между q' и $q' + dq'$.

Для функции $\langle l' | m' \rangle = \langle m' | l' \rangle^*$, осуществляющей преобразование от L -представления к M -представлению, можно ввести два вероятностных истолкования. Для простоты будем предполагать, что системы собственных значений l' и m' дискретны. Тогда, с одной стороны, величина $|\langle l' | m' \rangle|^2$ определяет вероятность получения значения l' при измерении величины L , производимом над системой, находящейся в состоянии $|m'\rangle$. С другой стороны, та же величина определяет вероятность получения значения m'

при измерении величины M , производимом над системой, находящейся в состоянии $|l'\rangle$. Эти вероятности равны. Величина $\langle l' | m' \rangle$ может быть названа волновой функцией для наблюдаемой величины M в L -представлении, а может быть также названа волновой функцией для наблюдаемой величины L в M -представлении.

Теория измерений играет важную роль в приложениях квантовой механики к измерению электромагнитных полей или детектированию сигналов в различных системах связи. Более детально мы будем обсуждать эти проблемы в следующих главах, а для более полного изучения теории измерений отошлем читателя к книгам Неймана [9] и Бомма [5]. Кроме того, все эти вопросы тесно связаны с принципом неопределенности Гейзенберга, который мы рассмотрим в следующем разделе.

1.13. Принцип неопределенности Гейзенберга

Пусть имеется ансамбль тождественных не взаимодействующих между собой квантовых систем, находящихся в одном и том же состоянии $|\psi\rangle$. В одной половине ансамбля мы измеряем только одну наблюдаемую величину A , а в другой половине ансамбля — другую наблюдаемую величину B . Каждая половина ансамбля имеет бесконечное число элементов. В этом случае измерение наблюдаемых величин A и B называется одновременным, ибо перед началом измерений состояние каждого элемента ансамбля было одинаковым.

Измерения наблюдаемой величины A на одном из элементов ансамбля дает одно собственное значение этой наблюдаемой величины, равное, например, a ; после такого измерения этот элемент ансамбля «перескакивает» из состояния $|\psi\rangle$ в состояние $|a\rangle$. Аналогично этому измерение наблюдаемой величины B на другом элементе ансамбля дает собственное значение этой величины, равное, например, b , и этот элемент ансамбля «перескакивает» в состояние $|b\rangle$. Вероятность того, что при однократном измерении величины A на одном элементе ансамбля, находящемся в состоянии $|\psi\rangle$, мы получим величину a , будет равна $|\langle a | \psi \rangle|^2$, а вероятность того, что при таком измерении величины B на другом элементе ансамбля мы получим величину b , будет равна $|\langle b | \psi \rangle|^2$.

Квантовое среднее (среднее по ансамблю) значение величин A и B для большого числа таких измерений равно

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad \langle B \rangle = \langle \psi | B | \psi \rangle, \quad (1.173)$$

где $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Вообще говоря, при таком измерении величин A и B всегда имеются отклонения от средних значений этих величин. Однако не надо думать, что эти флуктуации являются обычными флуктуациями, обусловленными несовершенством измеряющего прибора. Считается, что такой тип флуктуаций отсутствует. Пусть

$$\langle A^2 \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle, \quad \langle B^2 \rangle = \langle \psi | B^2 | \psi \rangle. \quad (1.174)$$

Тогда среднеквадратичные отклонения, или флуктуации, при измерении величин A и B , имеющие квантовую природу, равны

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2, \quad \langle (\Delta B)^2 \rangle = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2. \quad (1.175)$$

Эти флуктуации будут равны нулю в том и только в том случае, когда состояние системы является собственным состоянием величины A или величины B или обеих вместе. Фактически именно этим способом и можно определять собственное состояние какой-либо наблюдаемой величины: в собственном состоянии системы каждое измерение соответствующей величины всегда дает одно и то же собственное значение этой величины без каких бы то ни было флуктуаций.

Теперь мы допустим, что операторы наблюдаемых величин A и B не коммутируют друг с другом, и удовлетворяют условию коммутации

$$[A, B] = iC, \quad (1.176)$$

где C — постоянная или оператор.

Можно показать, что в этом случае обе наблюдаемые величины A и B не могут быть одновременно измерены с любой степенью точности (т. е. без каких бы то ни было флуктуаций) и что их среднеквадратичные отклонения удовлетворяют неравенству

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|^2, \quad (1.177)$$

где

$$\langle C \rangle = \langle \psi | C | \psi \rangle. \quad (1.178)$$

Неравенство (1.177) является математическим выражением принципа неопределенности Гейзенберга.

Прежде чем переходить к доказательству этого соотношения, обсудим вкратце значение этого принципа. Если при измерении наблюдаемой величины A мы получаем точное ее значение (т. е. без каких бы то ни было флуктуаций), то вектор $|\psi\rangle$ является собственным вектором наблюдаемой величины A . По аналогии, если при измерении наблюдаемой величины B в состоянии $|\psi\rangle$ мы получаем точное значение этой величины, то вектор $|\psi\rangle$ является также и собственным вектором наблюдаемой величины B . Отсюда следует, что если мы при одновременном измерении величин A и B получаем для них обеих точные значения (т. е. для обеих получаем собственные значения), то рассматриваемое состояние должно быть собственным состоянием одновременно для A и B^*). Последнее означает, что $\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle(\Delta B)^2\rangle = 0$, откуда благодаря принципу неопределенности (см. (1.177)) следует, что $|\langle C\rangle| = 0$. Это возможно только в том случае, когда $C = 0$, а в силу соотношений (1.176) это означает, что операторы A и B коммутируют друг с другом. Таким образом, если операторы двух наблюдаемых величин коммутируют, то эти две наблюдаемые величины могут быть одновременно измерены с любой степенью точности.

Если операторы A и B не коммутируют, а удовлетворяют равенству (1.176), то среднеквадратичные флуктуации, называемые иногда неопределенностью измерения, удовлетворяют условию (1.177).

Для того чтобы доказать неравенство (1.177), введем новые переменные α и β :

$$\alpha = A - \langle A \rangle, \quad \beta = B - \langle B \rangle. \quad (1.179)$$

* Вообще говоря, может существовать несколько состояний $|\psi\rangle$, в которых $\langle\psi|C|\psi\rangle = 0$. В каждом из этих состояний величины A и B могут быть одновременно измерены, хотя $[A, B] = iC \neq 0$. Один из таких случаев встретится нам в дальнейшем при изучении углового момента. Действительно, если L_x , L_y и L_z — компоненты углового момента L , то они удовлетворяют соотношению $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$. В то же время все эти три компоненты коммутируют с оператором квадрата полного момента L^2 . Тогда для состояния, в котором $L_z|\psi\rangle = 0$, величины $L_x|\psi\rangle$ и $L_y|\psi\rangle$ отличны от нуля и могут быть одновременно измерены.

Так как величины $\langle A \rangle$ и $\langle B \rangle$ являются обыкновенными числами, то из (1.176) следует, что операторы α и β удовлетворяют условию коммутации

$$[\alpha, \beta] = iC. \quad (1.180)$$

Поскольку $\langle \alpha \rangle = \langle \beta \rangle = 0$, то в силу (1.179) имеем

$$\langle (\Delta\alpha)^2 \rangle = \langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle \alpha^2 \rangle, \quad \langle (\Delta\beta)^2 \rangle = \langle (\Delta B)^2 \rangle = \langle \beta^2 \rangle. \quad (1.181)$$

Произведение этих величин равно

$$\langle (\Delta\alpha)^2 \rangle \langle (\Delta\beta)^2 \rangle = \langle \psi | \alpha^2 | \psi \rangle \langle \psi | \beta^2 | \psi \rangle. \quad (1.182)$$

Теперь воспользуемся неравенством Шварца, которое имеет вид

$$|\langle \varphi | \chi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle, \quad (1.183)$$

где $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$ — два произвольных кет-вектора, причем равенство имеет место тогда и только тогда, когда

$$|\varphi\rangle = c |\chi\rangle, \quad (1.184)$$

где c — постоянная (см. задачу 1.4 в конце главы). Так как величины A и B являются наблюдаемыми величинами, то из этого следует, что $\alpha = \alpha^+$ и $\beta = \beta^+$. Если в соотношении (1.183) принять $|\chi\rangle = \beta |\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle = \alpha |\psi\rangle$, то выражение (1.182) примет вид неравенства

$$\langle (\Delta\alpha)^2 \rangle \langle (\Delta\beta)^2 \rangle \geq |\langle \psi | \alpha\beta | \psi \rangle|^2. \quad (1.185)$$

С помощью соотношения (1.180) мы можем написать

$$\alpha\beta = \frac{1}{2} (\alpha\beta + \beta\alpha) + \frac{1}{2} (\alpha\beta - \beta\alpha) = \frac{1}{2} (\alpha\beta + \beta\alpha) + \frac{i}{2} C.$$

Если подставить это выражение в неравенство (1.185), то получится

$$\langle (\Delta\alpha)^2 \rangle \langle (\Delta\beta)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle \psi | (\alpha\beta + \beta\alpha) | \psi \rangle + i \langle \psi | C | \psi \rangle|^2. \quad (1.186)$$

Операторы $\alpha\beta + \beta\alpha$ и C эрмитовы*), а поэтому числа $\langle \psi | (\alpha\beta + \beta\alpha) | \psi \rangle$ и $\langle C \rangle = \langle \psi | C | \psi \rangle$ вещественны.

*) Последнее нетрудно показать, используя эрмитовость операторов A и B и условия коммутации (1.176), (1.180). (Прим. перев.)

Учитывая это и используя (1.181), выражение (1.186) можно записать в виде

$$\langle(\Delta\alpha)^2\rangle\langle(\Delta\beta)^2\rangle = \langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4} |\langle C \rangle|^2.$$

Это и есть принцип неопределенности (1.177).

В силу соотношений (1.184) и (1.186) знак равенства в соотношении неопределенностей (1.177) имеет место только тогда, когда

$$\alpha |\psi\rangle = c\beta |\psi\rangle, \quad (1.187a)$$

$$\langle\psi | (\alpha\beta + \beta\alpha) |\psi\rangle = 0, \quad (1.187b)$$

где c — постоянная.

Если кет-вектор $|\psi\rangle$ удовлетворяет условиям (1.187), то произведение неопределенностей $\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} |\langle C \rangle|$ оказывается минимальным.

В качестве специального примера применения полученных формул мы рассмотрим частицу в одном измерении и положим $A = q$ и $B = p$. В силу формул (1.117) коммутатор $[q, p] = i\hbar$, и поэтому соотношение (1.177) принимает в этом случае вид

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (1.188)$$

Если мы, например, измеряем импульс p системы, находящейся в собственном состоянии p , т. е. $|\psi\rangle = |p'\rangle$, то тогда $\langle p^2 \rangle = \langle p \rangle^2$ и $\langle(\Delta p)^2\rangle = 0$. В этом случае неравенство (1.188) означает, что среднеквадратичная флуктуация, возникающая при измерении одновременно с импульсом p и координаты q , оказывается бесконечной. Иными словами, если мы несколько раз подряд измеряем у частицы импульс p и всегда получаем одно и то же его значение p' , то мы при таком измерении ничего не знаем о координате q этой частицы. Аналогичный вывод получается и в том случае, когда $|\psi\rangle = |q'\rangle$, т. е. когда мы проводим измерение над частицей, находящейся в состоянии с определенным значением координаты q . В этом случае $\Delta q = 0$ и в силу (1.188) $\Delta p = \infty$.

Эти предельные случаи, когда кет-вектор $|\psi\rangle$ является собственным кет-вектором для операторов p и q , согласуются с вероятностной интерпретацией теории, рассмот-

ренной в предыдущем разделе. Если известно, что при измерении импульса частицы p мы всегда получаем точное его значение, равное p' , то вероятность того, что при таком измерении мы получим значения величины q , находящиеся в интервале от q' до $q' + dq'$, будет равна

$$P_q dq' = |\langle q' | p' \rangle|^2 dq' = \frac{dq'}{2\pi\hbar}, \quad (1.189)$$

где для вычисления величины $\langle q' | p' \rangle$ была использована функция (1.148). Эта величина не зависит от q' , и поэтому частица может с одинаковой вероятностью находиться в любой точке от $-\infty$ до $+\infty$. Иными словами, в согласии с принципом неопределенности, если $\Delta p = 0$, то $\Delta q = \infty$.

Точно так же, когда известно, что измерение координаты q дает точное ее значение q' , то вероятность того, что при таком измерении значение импульса p окажется в интервале от p' до $p' + dp'$, в силу (1.148) равна

$$P_p dp' = |\langle q' | p' \rangle|^2 dp' = \frac{dp'}{2\pi\hbar}. \quad (1.190)$$

Снова, если мы знаем координату частицы, то мы ничего не можем сказать о величине импульса частицы. Точное измерение координаты частицы q вызывает такое глубокое возмущение системы, что уже ничего не может быть известно об импульсе частицы.

В итоге мы можем сказать, что если система находится в состоянии $|\psi\rangle$ и над ней производится однократное измерение величины p , то в результате мы получаем одно из собственных значений p' , и в этом случае система переходит в состояние $|p'\rangle$. Это дает нам способ создания систем в состоянии $|p'\rangle$. Если система находится в состоянии $|\psi\rangle$, то вероятность получить значение p' при измерении величины p равна $|\langle p' | \psi \rangle|^2 dp'$. В общем случае система не будет находиться ни в собственном состоянии оператора p , ни в собственном состоянии оператора q , и поэтому величины Δp и Δq будут конечными и отличными от нуля. Однако интересно выяснить, в каком состоянии системы произведение неопределенностей $(\Delta p \Delta q)$ минимально. Это состояние системы соответствует минимальной степени локализации частицы в импульсном пространстве, когда ее координата находится в интервале

Δq координатного пространства. Для того чтобы найти это состояние, мы должны решить уравнения (1.187).

Если подставить уравнение (1.187a) и ему комплексно сопряженное в уравнение (1.187b), то получим

$$(c + c^*) \langle \psi | \beta^2 | \psi \rangle = 0.$$

Так как при этом $\langle \beta^2 \rangle = \langle (\Delta p)^2 \rangle \neq 0$ (вектор $|\psi\rangle$ не является собственным кет-вектором оператора p), то для того, чтобы выполнялось последнее равенство, необходимо, чтобы постоянная c была чисто мнимой. Мы запишем ее в виде $c = -i\xi$, где ξ — вещественная величина.

Для $\alpha = q - \langle q \rangle$ и $\beta = p - \langle p \rangle$ уравнение (1.187a) принимает вид

$$(q - \langle q \rangle) |\psi\rangle = -i\xi (p - \langle p \rangle) |\psi\rangle.$$

Если умножить обе части этого уравнения скалярно на собственный бра-вектор $\langle q' |$ и воспользоваться соотношениями (1.159) и (1.160), то получим

$$\frac{i}{\xi} (q' - \langle q \rangle) \psi(q') = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dq'} - \langle p \rangle \right) \psi(q'),$$

где $\psi(q') = \langle q' | \psi \rangle$.

Это простое дифференциальное уравнение первого порядка относительно волновой функции $\psi(q')$ имеет решение вида

$$\psi(q') = c_2 \exp \left[\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle q' - \frac{1}{2\hbar\xi} (q' - \langle q \rangle)^2 \right], \quad (1.191)$$

где c_2 — постоянная интегрирования.

Две неизвестные постоянные ξ и c_2 определяем, во-первых, из условия нормировки

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | q' \rangle dq' \langle q' | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(q')|^2 dq' = 1 \quad (1.192)$$

(здесь использована полнота системы) и, во-вторых, из требования, чтобы среднеквадратичная флуктуация величины q была

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle = \langle (q - \langle q \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(q')|^2 (q' - \langle q \rangle)^2 dq'. \quad (1.193)$$

Если мы используем известные выражения для интегралов

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-sx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{s}}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-sx^2} dx = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{s^{3/2}}, \quad (1.194)$$

то, подставив в (1.192) и (1.193) выражение (1.191) для функции $\psi(q')$, получим

$$|c_2|^2 \sqrt{\pi \hbar \xi} = 1, \quad |c_2|^2 \sqrt{\pi} (\hbar \xi)^{3/2} = 2 \langle (\Delta q)^2 \rangle.$$

Отсюда нетрудно показать, что $\hbar \xi = 2 \langle (\Delta q)^2 \rangle$ и $|c_2|^2 = [2\pi \langle (\Delta q)^2 \rangle]^{-1/2}$. Если выбрать фазу величины c_2 так, чтобы она оказалась вещественной, то выражение для $\psi(q')$ примет окончательный вид:

$$\psi(q') = \langle q' | \psi \rangle = \frac{1}{[2\pi \langle (\Delta q)^2 \rangle]^{1/4}} \exp \left[\frac{i \langle p \rangle q'}{\hbar} - \frac{(q' - \langle q \rangle)^2}{4 \langle (\Delta q)^2 \rangle} \right]. \quad (1.195)$$

Это так называемая волновая функция с минимальной неопределенностью в координатном представлении. Повторные измерения величины q для системы в таком состоянии дают нам средние значения $\langle q \rangle$ со среднеквадратичным отклонением $\langle (\Delta q)^2 \rangle$, а повторные измерения величины p дают среднее значение $\langle p \rangle$. Среднеквадратичная флуктуация величины p определяется через заданную среднеквадратичную флуктуацию $\langle (\Delta q)^2 \rangle$ величины q и равна $\langle (\Delta p)^2 \rangle = \hbar^2/4 \langle (\Delta q)^2 \rangle$. Заметим, что так как величины $\langle p \rangle$, $\langle q \rangle$ и $\langle (\Delta q)^2 \rangle$ произвольны, то существует тройная бесконечность состояний с минимальной неопределенностью. Эти состояния будут играть существенную роль в дальнейших обсуждениях вопроса об измерении электромагнитного поля.

Согласно вероятностной интерпретации квантовой теории вероятность того, что частица локализована между q' и $q' + dq'$, равна

$$|\psi(q')|^2 dq' = \frac{dq'}{\sqrt{2\pi \langle (\Delta q)^2 \rangle}} \exp \left[-\frac{(q' - \langle q \rangle)^2}{2 \langle (\Delta q)^2 \rangle} \right]. \quad (1.196)$$

Это известная гауссова функция распределения вероятности с центром в точке $q' = \langle q \rangle$ со среднеквадратичным (или нормальным) отклонением $\sqrt{\langle (\Delta q)^2 \rangle}$.

Уравнение (1.195) описывает в координатном пространстве состояние частицы с минимальной неопределенностью. Для того чтобы описать это состояние в импульсном пространстве, воспользуемся соотношениями (1.158) и (1.195). В результате получим

$$\begin{aligned} \varphi(p') &= \langle p' | \psi \rangle = \\ &= \frac{1}{[2\pi \langle (\Delta p)^2 \rangle]^{1/4}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \langle q \rangle (p' - \langle p \rangle) - \frac{(p' - \langle p \rangle)^2}{4 \langle (\Delta p)^2 \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (1.197)$$

Это выражение является импульсным представлением того же самого состояния с минимальной неопределенностью. Величина $|\varphi(p')|^2$ снова является гауссовой функцией в импульсном пространстве с центром в точке $p' = \langle p \rangle$ и с нормальным отклонением $\sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle} = \hbar/2 \sqrt{\langle (\Delta q)^2 \rangle}$. Функция $\psi(q')$ определяется однозначным образом через $\varphi(p')$ с помощью (1.68a).

С помощью выражения (1.157) мы можем ясно представить себе функцию $\psi(q')$ в виде суперпозиции плоских волн $\exp(ip'q'/\hbar)$ с длиной волны

$$\lambda = \frac{\hbar 2\pi}{p'} = \frac{h}{p'}. \quad (1.198)$$

Это и есть как раз длина волны де Бройля, которая связана с данной частицей. С помощью волн де Бройля объясняется волновая природа частиц в дифракционных опытах.

В формуле (1.157) функция $\varphi(p')$ давала амплитуду каждой из интерферирующих плоских волн. В случае состояния с минимальной неопределенностью эти волны усиливаются при интерференции в области порядка Δp в импульсном пространстве так, чтобы для величины $|\psi(q')|^2$ получилось большое значение как раз в соответствующей области Δq . Вне этой области плоские волны заметно ослабляют друг друга при интерференции, так что величина $|\psi(q')|^2$ становится незначительной. Таким образом, функция $\psi(q')$ представляет собой волновой пакет и соотношение (1.195) определяет волновой пакет с минимальной неопределенностью в фиксированный момент времени. С помощью волнового пакета можно локализовать частицу в ограниченных областях импульсного

и координатного пространства, так что в результате совокупность волн с различными амплитудами и частотами проявляет свойства, подобные свойствам частицы.

Следует отметить, что полученные в этом разделе соотношения не зависят от того, в каком силовом поле находится частица.

1.14. Динамическое поведение квантовой системы

Формулировка квантовой механики еще не является достаточно законченной, ибо мы не определили динамическое поведение системы, т. е. не установили, каким образом состояние системы изменяется во времени. До настоящего момента теория была развита лишь для некоторого фиксированного момента времени.

В отсутствие возмущений, обусловленных каким-либо измерением, производимым над системой, развитие системы во времени носит всецело причинный характер. Причинное развитие системы во времени может быть нарушено только благодаря возмущениям, которые вызываются взаимодействием измерительного прибора с этой системой.

Для того чтобы определить, каким образом происходит развитие квантовой системы во времени, мы постулируем наличие у системы гамильтониана H и требуем, чтобы произвольный кет-вектор состояния системы $|\psi(t)\rangle$ подчинялся уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (1.199)$$

где оператор H рассматривается как оператор некоторой наблюдаемой величины в нашей системе и, следовательно, должен быть эрмитовым.

При этом могут иметь место два случая. В первом случае система консервативна и оператор H не зависит явно от времени. Тогда мы можем формально проинтегрировать уравнение (1.199) и получить

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (1.200)$$

где

$$U(t, t_0) = \exp \left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar} \right], \quad (1.201)$$

а вектор $|\psi(t_0)\rangle$ изображает состояние системы в момент времени t_0 . Полученное решение можно проверить прямым дифференцированием равенства (1.200) с последующей подстановкой в исходное уравнение (1.199). Производная оператора $U(t, t_0)$ по t определяется точно так же, как и производная от обычных функций.

Из выражения (1.201) следует, что оператор U удовлетворяет следующему уравнению:

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU. \quad (1.202)$$

Согласно же равенству (1.200) оператор U должен удовлетворять следующему начальному условию:

$$U(t_0, t_0) = I. \quad (1.203)$$

Так как оператор H эрмитов, то из выражения (1.201) следует, что имеет место соотношение

$$U^+(t, t_0) = \exp\left[\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = U^{-1}(t, t_0), \quad (1.204)$$

которое показывает, что оператор U является и унитарным оператором. Следовательно, можно утверждать, что состояние системы в момент времени t получается вполне причинным образом из состояния системы в момент времени t_0 с помощью некоторого унитарного преобразования. Основываясь на геометрическом представлении векторов состояний, мы можем представить преобразование (1.200) в виде некоторого обобщенного непрерывного поворота вектора состояния в кет-пространстве от некоторого начального направления в момент времени t_0 к конечному направлению, соответствующему состоянию системы в момент времени t . Так как $U^{-1} = U^+$, то норма вектора $|\psi(t)\rangle$ равна

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | U^+(t, t_0) U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \\ &= \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (1.205)$$

и не изменяется со временем.

Во втором случае гамильтониан системы явно зависит от времени. Теперь система неконсервативна и находится под воздействием некоторой внешней силы, зависящей от времени. Однако и в этом случае гамильтониан является

наблюдаемой величиной, а следовательно, он эрмитов. Мы постулируем, что остается справедливым уравнение Шредингера (1.199), но с гамильтонианом $H = H(t)$, а также и то, что решение этого уравнения имеет вид (1.200) с оператором U , удовлетворяющим соотношениям (1.202) и (1.203). Однако соотношение (1.201) уже несправедливо, и поэтому мы пока не можем утверждать, что оператор U унитарен. Докажем, что если справедливо соотношение (1.203), то оператор U унитарен. Доказательство будем вести следующим образом. Запишем соотношение, комплексно сопряженное соотношению (1.202) (при условии, что $H = H^+$):

$$-i\hbar \frac{dU^+}{dt} = U^+H. \quad (1.206)$$

Если мы теперь умножим обе части уравнения (1.202) слева на U^+ , а обе части (1.206) — справа на U и вычтем одно из другого, то получим

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^+ U = i\hbar \frac{dU^+}{dt} U + i\hbar U^+ \frac{dU}{dt} = 0.$$

Отсюда видно, что величина $U^+ U$ остается постоянной с течением времени. Для того чтобы удовлетворить начальному условию (1.203), мы положим эту постоянную равной единице:

$$U^+(t, t_0) U(t, t_0) = 1. \quad (1.207)$$

С другой стороны, если мы умножим обе части уравнения (1.202) справа на U^+ , а обе части (1.206) — слева на U и вычтем одно из другого, то получим

$$i\hbar \frac{d}{dt} UU^+ = [H, UU^+]. \quad (1.208)$$

Вообще говоря, величина $d(UU^+)/dt$ отлична от нуля. Однако так как в силу соотношения (1.203) $U(t_0, t_0) = 1$, а значит, и $U^+(t_0, t_0) = 1$, то в момент времени $t = t_0$, $UU^+ = 1$. Отсюда следует, что при последовательном интегрировании обеих сторон уравнения (1.208) методом последовательных приближений можно показать, что $UU^+ = 1$ для любого момента времени t . Таким образом, оператор U унитарен, если он удовлетворяет условию (1.203).

Читатель, который незнаком с операторами, может предположить, что решение уравнения Шредингера для неконсервативной системы может быть записано по аналогии с решением (1.201) в виде

$$U(t, t_0) = \exp \left[-i \int_{t_0}^t H(t') dt' / \hbar \right]. \quad (1.209)$$

То, что это не так, следует уже из того факта, что интеграл по времени от оператора $H(t)$, вообще говоря, не коммутирует с оператором $H(t)$ (см. задачи 1.5 и 1.6 в конце главы), хотя оператор $H(t)$ коммутирует сам с собой в один и тот же момент времени.

Для того чтобы показать, что выражение (1.209) не является правильным решением, получим формально выражение для оператора $U(t, t_0)$ интегрированием уравнения (1.199) с помощью метода последовательных приближений (метод итераций). Если мы умножим уравнение (1.199) на dt' и проинтегрируем от t_0 до t , то получим интегральное уравнение.

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') |\psi(t')\rangle dt'. \quad (1.210)$$

Подставим теперь в подынтегральное выражение величину $|\psi(t')\rangle$, полученную заменой t на t' в уравнении (1.210), т. е. выражение вида

$$|\psi(t')\rangle = |\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} H(t'') |\psi(t'')\rangle dt''.$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = & |\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' |\psi(t_0)\rangle + \\ & + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t H(t') dt' \int_{t_0}^{t'} H(t'') dt'' |\psi(t'')\rangle. \end{aligned}$$

Если повторить эту процедуру бесконечное число раз, то

приходим к следующему выражению:

$$|\psi(t)\rangle = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t H(t') dt' \int_{t_0}^{t'} H(t'') dt'' + \dots \right] |\psi(t_0)\rangle \equiv U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (1.211)$$

Выражение (1.211) дает формальное решение для функции $U(t, t_0)$, которое, как нетрудно видеть, не согласуется с двумя первыми членами разложения выражения (1.209), ибо в общем случае

$$\frac{1}{2!} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right]^2 \neq \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t H(t') dt' \int_{t_0}^{t'} H(t'') dt''.$$

В дальнейшем для некоторых консервативных систем специального вида мы разработаем другие методы решения уравнения для оператора U .

1.15. Представление Шредингера в квантовой механике

До сих пор квантовая механика была развита нами в так называемом представлении Шредингера. Рассмотрим в этом представлении движение одномерной частицы. Ранее мы связали с наблюдаемыми величинами (p , q и H) соответствующие эрмитовы операторы, которые не зависели от времени. Индекс S у оператора или вектора будет указывать теперь на то, что эти операторы или векторы рассматриваются в представлении Шредингера, так что мы запишем p_S , q_S и H_S . Собственные векторы этих операторов записываются в виде $|p'\rangle_S$, $|q'\rangle_S$, $|E\rangle_S$. Для представления операторов или векторов состояния в качестве стационарных (не зависящих от времени) базисных векторов могут быть выбраны любые из этих собственных векторов. В шредингеровской картине собственные векторы состояний фактически стационарны и ведут себя аналогично базисным векторам фиксированной координатной системы в обычной геометрии. В некоторый определенный момент времени любое состояние системы изображается в виде линейной суперпозиции системы стационарных базисных векторов.

В шредингеровском представлении операторы подчиняются соотношениям коммутации вида $[q_s, p_s] = i\hbar$ и $[q_s, q_s] = [p_s, p_s] = 0$.

Вектор состояния $|\psi_s(t)\rangle$ описывает динамическое поведение системы с течением времени в представлении Шредингера. В соответствии с полученным выше решением уравнения Шредингера вектор состояния с течением времени непрерывно поворачивается от начального направления $|\psi(t_0)\rangle$ в кет-пространстве к конечному направлению $|\psi_s(t)\rangle$ в момент времени t .

Если функция $f(p_s, q_s)$ зависит от операторов p_s и q_s , то ее квантовое среднее (по ансамблю) значение в момент времени t равно

$$\langle f(p_s, q_s) \rangle = \langle \psi_s(t) | f(p_s, q_s) | \psi_s(t) \rangle. \quad (1.212)$$

Если система в момент времени t_0 находится в состоянии $|\psi(t_0)\rangle$, то в силу (1.200) состояние этой системы в момент времени t определяется вектором $|\psi_s(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$. Вероятность того, что в некоторый момент времени t_1 система будет находиться в некотором состоянии $\langle u |$, равна

$$|\langle u | \psi_s(t_1) \rangle|^2 = |\langle u | U(t_1, t_0) | \psi(t_0) \rangle|^2. \quad (1.213)$$

Это описание, в котором базисные векторы стационарны, а вектор $|\psi_s(t)\rangle$ динамического состояния системы поворачивается с течением времени в кет-пространстве, и называется шредингеровским представлением квантовой механики. Именно эта картина и использовалась до сих пор.

1.16. Представление Гейзенберга

В представлении Шредингера базисные векторы (т. е. любые собственные кет-векторы наблюдаемых величин) изображаются в виде фиксированной стационарной системы векторов, а вектор динамического состояния системы движется. Однако, как и в классической механике, эта же система может описываться таким образом, что ее базисные векторы поворачиваются с течением времени, а вектор динамического состояния системы остается без изменения. Этот способ формулировки квантовой механики, физически эквивалентный представлению Шредингера,

называется представлением Гейзенберга. Очевидно, что если в шредингеровском представлении операторы не зависят от времени, то для того, чтобы эти два описания были физически эквивалентны друг другу, необходимо, чтобы в гейзенберговском представлении эти операторы уже зависели бы от времени.

Согласно приведенному выше определению векторы состояний системы в этих двух представлениях связаны между собой соотношением (1.200):

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_H(t_0)\rangle, \quad (1.214)$$

где индекс H означает, что данная величина рассматривается в представлении Гейзенберга. Вектор $|\psi_H(t_0)\rangle$ стационарен (т. е. неподвижен в кет-пространстве), а вектор $|\psi_S(t)\rangle$ является переменным вектором (т. е. движется в кет-пространстве). Так как

$$U(t_0, t_0) = 1,$$

то в момент времени $t = t_0$ векторы состояний в обоих представлениях совпадают друг с другом.

Используя соотношения (1.214) и комплексно-сопряженное ему, нетрудно получить выражение для среднего значения оператора A_S (сравните с (1.212)):

$$\langle A \rangle = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H(t_0) | U^+ A_S U | \psi_H(t_0) \rangle. \quad (1.215)$$

Оператор в представлении Гейзенберга можно определить следующим образом:

$$A_H(t) = U^+(t, t_0) A_S U(t, t_0). \quad (1.216)$$

Из этого определения мы видим, что операторы, которые стационарны в представлении Шредингера, в представлении Гейзенберга оказываются зависящими от времени. Преобразование (1.216) называется преобразованием подобия, когда $U^+ = U^{-1}$. По определению средние значения операторов A в момент времени t могут быть записаны в виде

$$\langle A \rangle = \langle \psi_H(t_0) | A_H(t) | \psi_H(t_0) \rangle. \quad (1.217)$$

Закон преобразования операторов (1.216) необходим для того, чтобы среднее значение оператора A оставалось

одинаковым в обоих представлениях. В этом случае оба представления оказываются физически эквивалентными друг другу.

Уравнение движения для наблюдаемой величины в представлении Гейзенберга может быть получено из соотношения (1.216). Следует отметить, что соотношение (1.216) справедливо даже тогда, когда оператор A явно зависит от времени. Если продифференцировать обе части (1.216) по t и использовать соотношения (1.202), (1.206), а также условия унитарности $U^+U = UU^+ = 1$, то получим

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dA_{\text{H}}}{dt} &= U^+ A_{\text{S}} H U - U^+ H A_{\text{S}} U + i\hbar U^+ \frac{\partial A_{\text{S}}}{\partial t} U = \\ &= U^+ A_{\text{S}} U U^+ H U - U^+ H U U^+ A_{\text{S}} U + i\hbar U^+ \frac{\partial A_{\text{S}}}{\partial t} U \equiv \\ &\equiv [A_{\text{H}}, H_{\text{H}}] + i\hbar \frac{\partial A_{\text{H}}}{\partial t}, \quad (1.218) \end{aligned}$$

где H_{H} — гамильтониан в представлении Гейзенберга,

$$H_{\text{H}}(t) = U^+(t, t_0) H_{\text{S}}(t) U(t, t_0), \quad (1.219)$$

$$\frac{\partial A_{\text{H}}}{\partial t} = U^+(t, t_0) \frac{\partial A_{\text{S}}}{\partial t} U(t, t_0). \quad (1.220)$$

Уравнение (1.218) называется уравнением движения Гейзенберга для наблюдаемой величины. Если

$$dA_{\text{H}} / dt = 0,$$

то в этом случае величина A_{H} называется интегралом движения.

В качестве специального примера рассмотрим уравнение (1.218) в случае, когда $A_{\text{S}} = H_{\text{S}}$. Если система консервативна, то $\partial H_{\text{S}} / \partial t = 0$ и оператор $U(t, t_0)$ определяется соотношением (1.201). Так как в этом случае $[H_{\text{S}}, U] = 0$, то в силу определения (1.219) $H_{\text{H}} = H_{\text{S}}$. В результате из соотношения (1.218) мы получим уравнение

$$\frac{dH_{\text{H}}}{dt} = 0, \quad (1.221)$$

которое показывает, что величина H в данном случае является интегралом движения.

Если оператор A_S не зависит явно от времени и система консервативна, то уравнение (1.218) приводится к уравнению вида

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A_H, H]. \quad (1.222)$$

Если оператор A_H коммутирует с гамильтонианом, то оператор A_H является интегралом движения.

В представлении Гейзенберга вектор динамического состояния системы фиксирован, а базисные векторы движутся и состояние системы рассматривается с точки зрения движущейся системы координат. В представлении Шредингера, когда величина A_S является наблюдаемой, мы имеем соотношение

$$A_S |a'\rangle_S = a' |a'\rangle_S, \quad (1.223)$$

в котором базисные собственные кет-векторы $|a'\rangle_S$ стационарны.

Однако поскольку собственные значения a' являются физически наблюдаемыми и измеряемыми величинами, то они не должны зависеть от того, измеряются ли они в системе координат со стационарными базисными векторами, соответствующей представлению Шредингера, или в системе координат с вращающимися базисными векторами, соответствующей представлению Гейзенберга. Поэтому, так как $U^+ = U^{-1}$, то

$$A_S = UA_HU^+.$$

Если мы используем последнее соотношение, то соотношение (1.223) принимает вид

$$UA_HU^+ |a'\rangle_S = a' |a'\rangle_S,$$

или, умножая слева на U^+ , получим

$$A_H(t) [U^+(t, t_0) |a'\rangle_S] = a' [U^+(t, t_0) |a'\rangle_S]. \quad (1.224)$$

Так как собственные значения a' должны быть одинаковыми в обоих представлениях, то собственные кет-векторы в представлении Гейзенберга изменяются в

соответствии со следующим законом:

$$|a', t\rangle_{\text{H}} = U^+(t, t_0) |a', t_0\rangle_{\text{S}}. \quad (1.225)$$

Иными словами, базисные векторы изменяются в представлении Гейзенберга и стационарны в представлении Шредингера. (При этом мы поместили t и t_0 внутри кет-векторов, для того чтобы указать их зависимость от t и t_0 .)

Другое важное утверждение состоит в том, что соотношения коммутации имеют одинаковый вид в обоих представлениях. Очевидно, это должно выполняться для того, чтобы оба представления были физически эквивалентны друг другу. Для примера положим, что величины A_{S} , B_{S} и C_{S} являются тремя наблюдаемыми величинами, записанными в представлении Шредингера, а их операторы удовлетворяют соотношению коммутации вида

$$[A_{\text{S}}, B_{\text{S}}] = iC_{\text{S}}. \quad (1.226)$$

Если умножить обе части этого равенства слева на оператор U^+ , а справа на оператор U , то получим

$$U^+ A_{\text{S}} B_{\text{S}} U - U^+ B_{\text{S}} A_{\text{S}} U = iU^+ C_{\text{S}} U$$

или, вставляя между операторами A_{S} и B_{S} тождественный оператор $UU^+ = 1$, получим равенство

$$(U^+ A_{\text{S}} U)(U^+ B_{\text{S}} U) - (U^+ B_{\text{S}} U)(U^+ A_{\text{S}} U) = iU^+ C_{\text{S}} U,$$

которое в силу определения (1.216) принимает вид

$$[A_{\text{H}}(t), B_{\text{H}}(t)] = iC_{\text{H}}(t). \quad (1.227)$$

Последнее соотношение имеет ту же самую форму, что и соотношение (1.226). Коротко говоря, представление Гейзенберга и представление Шредингера физически эквивалентны друг другу.

Если величина A_{H} является интегралом движения, то оператор этой величины коммутирует с гамильтонианом. Собственные значения этого оператора одинаковы в представлении Гейзенберга и в представлении Шредингера. В этом случае часто говорят, что эти собственные значения являются «хорошими» квантовыми числами.

Представление Гейзенберга весьма полезно для наглядной иллюстрации формальной аналогии между квантовой системой и ее классическим аналогом. Мы снова рассмотрим пример с частицей, движущейся в одном измерении, и покажем, что в этом случае уравнение движения для гейзенберговского оператора совпадает по форме с классическим уравнением движения Гамильтона. Для систем, имеющих классический аналог, это соответствие позволяет дополнительно проверить справедливость теории.

Рассмотрим гамильтониан (1.116), являющийся функцией от операторов импульса p и координаты q . Так как с помощью соотношения (1.227) можно показать, что формулы (1.120а) и (1.120б) справедливы и в представлении Гейзенберга, то уравнения движения (1.218) для операторов $A_H = q_H$ или $A_H = p_H$ имеют вид

$$\frac{dq_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [q_H, H_H(p_H, q_H)] = \frac{\partial H_H}{\partial p_H}, \quad (1.228)$$

$$\frac{dp_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_H, H_H(p_H, q_H)] = -\frac{\partial H_H}{\partial q_H},$$

так как

$$\partial q_S / \partial t = 0 = \partial p_S / \partial t.$$

Уравнения (1.228) по форме совпадают с классическими уравнениями Гамильтона

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \quad (1.229)$$

Если не касаться вопроса о порядке операторов в уравнениях (1.228), то эти уравнения совпадают с соответствующими классическими уравнениями (1.229).

В классической механике величина A , являющаяся функцией p , q и t , удовлетворяет уравнению движения

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial A}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial A}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1.230)$$

в котором использованы уравнения Гамильтона (1.229). Определим классические скобки Пуассона соотношением вида

$$\{A, H\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q}. \quad (1.231)$$

Тогда уравнение (1.230) примет вид

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (1.232)$$

Сравнивая соотношения (1.232) и (1.218), мы видим, что можно перейти от уравнений движения в классической механике к соответствующим уравнениям движения в квантовой механике путем замены скобок Пуассона коммутатором по формуле

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B]. \quad (1.233)$$

Можно показать, что алгебра коммутаторов и алгебра скобок Пуассона одинаковы (см. в конце главы задачу 1.8). Все это дает основание к введению в теорию квантовых постулатов (1.117). Если же система не имеет никакого классического аналога, то правила квантования вида (1.117) являются практически делом чистой интуиции. Единственный способ проверки состоит в сравнении результатов теории с экспериментом (как это всегда и бывает).

1.17. Представление взаимодействия

Кроме разобранных выше двух представлений существует еще одно представление, которое оказывается особенно удобным в том случае, когда гамильтониан системы может быть записан в виде суммы двух слагаемых в форме*)

$$H^S = H_0^S + H_1^S. \quad (1.234)$$

*) Здесь обычно H_0^S — гамильтониан невзаимодействующих частиц, для которых квантовомеханическую задачу можно решить точно, а член H_1^S описывает взаимодействие между частицами. (Прим. перев.)

Это представление называется представлением взаимодействия, и оно получается из представления Шредингера с помощью некоторого унитарного преобразования

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^+(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle, \quad (1.235)$$

где индекс I означает, что данная величина рассматривается в представлении взаимодействия. Оператор $U_0(t, t_0)$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{dU_0}{dt} = H_0^S U_0 \quad (1.236)$$

и начальному условию

$$U_0(t_0, t_0) = I \quad (1.237)$$

(где I — оператор тождественного преобразования). Отсюда следует, что оператор $U_0(t, t_0)$ является унитарным (см. стр. 91):

$$U_0^+(t, t_0) = U_0^{-1}(t, t_0).$$

Операторы H_0^S и H_1^S , как операторы наблюдаемых величин, по-прежнему являются эрмитовыми.

При переходе от представления Шредингера к представлению взаимодействия операторы преобразуются по формуле

$$A_I(t) = U_0^+(t, t_0) A_S U_0(t, t_0). \quad (1.238)$$

Легко показать, что эта формула приводит к следующему уравнению движения для оператора $A_I(t)$:

$$i\hbar \frac{dA_I}{dt} = [A_I, H_0^I] + i\hbar \frac{\partial A_I}{\partial t}, \quad (1.239)$$

где

$$H_0^I = U_0^+ H_0 U_0, \quad \frac{\partial A_I}{\partial t} = U_0^+ \frac{\partial A_S}{\partial t} U_0. \quad (1.240)$$

Читателю предоставляется возможность в качестве упражнения показать, что векторы динамических состояний системы удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{d|\psi_I(t)\rangle}{dt} = H_1^I |\psi_I(t)\rangle, \quad (1.241)$$

где

$$H_1^I = U_0^+ H_1^S U_0. \quad (1.242)$$

Мы предоставляем читателю также доказательство физической эквивалентности представления Шредингера и представления взаимодействия. Последнее является промежуточным между представлениями Гейзенберга и Шредингера. В этом представлении изменяются одновременно и базисные векторы, и векторы динамического состояния системы.

Следует отметить, что аналогичным образом можно ввести и другие физически эквивалентные представления, если только определить соответствующий унитарный оператор U . С другим таким представлением мы познакомимся в одной из следующих глав этой книги.

1.18. Волновая механика

Мы уже достаточно много говорили о волновой функции и о волновой механике вообще. Поэтому в данном разделе мы только бегло напомним основные понятия волновой механики. Волновая механика есть квантовая механика в шредингеровской картине*) в координатном представлении. Приведем теперь основные полученные результаты для одномерной частицы.

Координатное представление (шредингеровское) определяется известными уравнениями для собственных значений:

$$q|q'\rangle = q' |q'\rangle. \quad (1.243)$$

Соотношение ортонормировки

$$\langle q''|q'\rangle = \delta(q' - q'') \quad (1.244)$$

может рассматриваться как координатная волновая функция в координатном представлении. Левая часть равенства (1.244) является также представителем собственного кет-вектора $|q'\rangle$ в q -представлении. При этом система

*) Автор пользуется термином «картина», когда речь идет о различных способах описания изменения состояния во времени (шредингеровская картина, гейзенберговская картина, картина взаимодействия). В остальных случаях автор использует термин «представление»: импульсное, энергетическое, координатное и т. д. Часто в литературе и в том и в другом случае употребляется термин «представление». Из приведенной выше фразы видно, что термин «картина» в некоторых случаях действительно удобен. (Прим. перев.)

собственных кет-векторов является полной, так что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q'\rangle dq' \langle q'| = I. \quad (1.245)$$

Векторы состояния $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяют уравнению движения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle = \left[\frac{p^2}{2m} + V(q) \right] |\psi(t)\rangle. \quad (1.246)$$

Представитель состояния $|\psi(t)\rangle$ в q -представлении имеет вид

$$\psi(q', t) \equiv \langle q' | \psi(t) \rangle. \quad (1.247)$$

Это как раз и есть шредингеровская волновая функция состояния $|\psi(t)\rangle$ в момент времени t . Если мы возьмем скалярное произведение уравнения (1.246) на бра-вектор $\langle q'|$, то, используя соотношения (1.247), (1.159) и (1.160), получим волновое уравнение Шредингера, зависящее от времени:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q', t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q'^2} + V(q') \right] \psi(q', t). \quad (1.248)$$

Мы использовали равенство

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(q', t) = \langle q' | \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle,$$

которое справедливо, потому что собственный вектор $\langle q'|$ в представлении Шредингера не зависит от времени.

Благодаря равенству (1.215) среднее значение функции $F(p, q)$ в момент времени t равно

$$\begin{aligned} \langle F(p, q) \rangle &= \langle \psi(t) | F(p, q) | \psi(t) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi(t) | q' \rangle dq' \langle q' | F(p, q) | q'' \rangle dq'' \langle q'' | \psi(t) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(q', t) F\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q'}, q'\right) \psi(q', t) dq'. \end{aligned} \quad (1.249)$$

Здесь мы дважды использовали соотношение полноты (1.245), а также соотношения (1.154), (1.155) и 1.247).

Собственный кет-вектор $|p'\rangle$ оператора p в q -представлении согласно равенству (1.148) имеет вид

$$\langle q' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip'q'}{\hbar}\right). \quad (1.250)$$

Это выражение является собственной функцией оператора импульса в координатном представлении. С помощью этой функции преобразования мы можем переходить в прединтергеровской картине от импульсного представления к координатному и обратно.

1.19. Свободная частица. Изменение во времени волнового пакета с минимальной неопределенностью

В этом разделе мы рассмотрим свободную частицу, для которой потенциал $V(q) = 0$. Тогда гамильтониан системы принимает вид

$$H = \frac{p^2}{2m} = H^+. \quad (1.251)$$

Так как система консервативна, то величина H является интегралом движения. А так как, кроме того,

$$[p, H] = 0, \quad (1.252)$$

то величина p также является интегралом движения для свободной частицы.

Оператор p удовлетворяет уравнению для собственных значений

$$p | p' \rangle = p' | p' \rangle, \quad (1.253)$$

где $-\infty < p' < +\infty$. Если мы теперь подействуем оператором H слева на обе стороны равенства (1.253), то в силу коммутативности операторов H и p получим

$$Hp | p' \rangle = pH | p' \rangle = p'H | p' \rangle. \quad (1.254)$$

Отсюда следует, что и вектор $H | p' \rangle$ также является собственным кет-вектором оператора p с собственным значением p' . Поэтому кет-вектор $H | p' \rangle$ может отличаться от кет-вектора $| p' \rangle$ только постоянным множителем, который обозначим через E . Тогда можно написать

$$H | p' \rangle = E | p' \rangle. \quad (1.255)$$

Последнее уравнение и является как раз уравнением задачи на собственные значения энергии. Благодаря коммутативности операторов p и H собственный кет-вектор оператора p одновременно является и собственным кет-вектором оператора H . Поэтому мы можем записать уравнение (1.255) в виде

$$H|p', E\rangle = E|p', E\rangle. \quad (1.256)$$

С помощью (1.254) и уравнения (1.253) мы можем получить

$$\frac{p^3}{2m}|p', E\rangle = \frac{p'^2}{2m}|p', E\rangle = E|p', E\rangle, \quad (1.257)$$

откуда собственные значения оператора H равны

$$E = \frac{p'^2}{2m}. \quad (1.258)$$

Они непрерывны и принимают любое значение от 0 до $+\infty$. Таким образом, решение задачи на собственные значения энергии для свободной частицы оказывается весьма простым. Следует отметить только, что два различных собственных значения импульса $+p'$ и $-p'$ дают одно и то же собственное значение энергии E , т. е. состояния $|+p', E\rangle$ и $|-p', E\rangle$, соответствующие движению частицы направо и налево, имеют одинаковые значения энергии. Это первый встретившийся нам пример вырождения в квантовой системе.

Решение уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} |\psi(t)\rangle \quad (1.259)$$

благодаря соотношению (1.201) имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) |\psi(0)\rangle. \quad (1.260)$$

В координатном представлении волновая функция, зависящая от времени, имеет вид

$$\psi(q', t) = \langle q' | \psi(t) \rangle = \left\langle q' \left| \exp\left(-\frac{ip^2t}{2m\hbar}\right) \right| \psi(0) \right\rangle. \quad (1.261)$$

С помощью соотношения полноты для собственных векторов $|p'\rangle$ последнее равенство можно записать в виде

$$\begin{aligned}\psi(q', t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q' | \exp\left(-\frac{ip'^2 t}{2m\hbar}\right) | p' \rangle dp' \langle p' | \psi(0) \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{ip'^2 t}{2m\hbar}\right) \langle q' | p' \rangle dp' \varphi(p', 0) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{ip'^2 t}{2m\hbar}\right) \exp\left(\frac{ip'q'}{\hbar}\right) \varphi(p', 0) dp', \quad (1.262)\end{aligned}$$

где мы использовали выражение (1.148) для величины $\langle q' | p' \rangle$ и приняли, что

$$\langle p' | \psi(0) \rangle = \varphi(p', 0). \quad (1.263)$$

Формула (1.262) дает выражение для волновой функции $\psi(q', t)$ в координатном представлении через начальную волновую функцию $\varphi(p', 0)$ в импульсном представлении.

Рассмотрим специальный случай волновой функции с минимальной неопределенностью. Тогда в начальный момент времени функция $\varphi(p', 0)$ имеет вид (1.197). Изменение такого волнового пакета с течением времени определяется формулой (1.262):

$$\begin{aligned}\psi(q', t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar} [2\pi \langle (\Delta p)^2 \rangle]^{1/4}} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{ip'^2 t}{2m\hbar} + \frac{ip'q'}{\hbar} - \frac{i}{\hbar} \langle q \rangle (p' - \langle p \rangle) - \frac{(p' - \langle p \rangle)^2}{4 \langle (\Delta p)^2 \rangle}\right] dp'. \quad (1.264)\end{aligned}$$

Для простоты будем считать, что $\langle p \rangle_{t=0} = \langle q \rangle_{t=0} = 0$. Если заменить $\sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle_{t=0}}$ на $\hbar/2 \sqrt{\langle (\Delta q^2) \rangle_{t=0}}$, то, выполняя интегрирование, получим

$$\begin{aligned}\psi(q', t) &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/4} (\sqrt{\langle (\Delta q^2) \rangle} + i\hbar t/2m \sqrt{\langle (\Delta q^2) \rangle})^{1/2}} \exp\left[-\frac{q'^2}{4\langle (\Delta q^2) \rangle + 2i\hbar t/m}\right], \quad (1.265)\end{aligned}$$

где

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle = |\langle \psi(0) | q^2 | \psi(0) \rangle|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} q'^2 |\psi(q', 0)|^2 dq'.$$

Если теперь вычислить среднее значение величины $\langle q \rangle_t$ в любой момент времени t , то с помощью формул (1.249) и (1.265) получим

$$\langle q \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(q', t)|^2 q' dq' = 0. \quad (1.266)$$

Иными словами, частица в среднем все время остается в точке $q' = 0$. Однако среднеквадратичное отклонение частицы от точки q' в момент времени t равно

$$\langle q^2 \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(q', t)|^2 q'^2 dq' = \langle [\Delta q]^2 \rangle_{t=0} + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \langle [\Delta q]^2 \rangle_{t=0}}, \quad (1.267)$$

т. е. в момент времени t оно оказывается больше, чем среднеквадратичное отклонение от положения $q' = 0$ в начальный момент времени $t = 0$. Волновой пакет с течением времени расплывается в координатном пространстве. Причем чем меньше флуктуация $\sqrt{\langle (\Delta q)^2 \rangle}$ в начальный момент времени $t = 0$, тем быстрее происходит расплывание такого волнового пакета с течением времени.

Из полученных нами выше формул (1.249) и (1.265) можно видеть также, что среднее значение импульса такой частицы в любой момент времени t равно нулю:

$$\langle p \rangle_t = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(q', t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(q', t)}{\partial q'} dq' = 0. \quad (1.268)$$

В то же время среднеквадратичное отклонение импульса от $p' = 0$ в момент времени t остается без изменения и равно начальному среднеквадратичному отклонению:

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle_t &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(q', t) \frac{\partial^2}{\partial q'^2} \psi(q', t) dq' = \frac{\hbar^2}{4 \langle [\Delta q]^2 \rangle_{t=0}} = \\ &= \langle p^2 \rangle_{t=0}. \end{aligned} \quad (1.269)$$

Следовательно, произведение неопределенностей в момент времени t равно

$$\langle [\Delta p]_t^2 \rangle \langle [\Delta q]_t^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} + \left[\frac{\hbar^2}{4 \langle [\Delta q]_{t=0}^2 \rangle} \right]^2 t^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (1.270)$$

Таким образом, произведение неопределенностей, которое было минимальным в начальный момент, с течением времени увеличивается. В дальнейшем мы свяжем распыление волнового пакета с нулевыми флуктуациями электромагнитного поля.

ЗАДАЧИ

1.1. С помощью метода математической индукции вывести соотношения коммутации (1.118).

1.2. Вычислить следующие коммутаторы:

а) $[q, \sin(p^2q)]$, в) $[q, \sin(pqp)]$, с) $[q, \sin(qp^2)]$,

если операторы p и q удовлетворяют соотношению $[q, p] = i\hbar$.

1.3. Решить задачу о собственных значениях оператора p , $p | p' \rangle = p' | p' \rangle$, в координатном представлении. (Указание: использовать соотношение (1.159)).

1.4. Даны два произвольных кет-вектора $|\varphi\rangle$ и $|\chi\rangle$. Показать, что они удовлетворяют неравенству Шварца

$$|\langle \varphi | \chi \rangle|^2 \leq \langle \varphi | \varphi \rangle \langle \chi | \chi \rangle.$$

Показать, что равенство выполняется в том и только в том случае, когда $|\varphi\rangle = c |\chi\rangle$, где c — постоянное число.

1.5. Показать, что любая функция от эрмитова оператора вида

$$H(t) = p \sin \omega t + q \cos \omega t$$

коммутирует с $H(t)$, но не коммутирует с $\int_0^t H(t') dt'$, т. е.

$$\left[\int_0^t H(t') dt', H(t) \right] \neq 0, \text{ если операторы } q \text{ и } p \text{ даны в представлении Шредингера и удовлетворяют условию коммутации } [q, p] = i\hbar.$$

Можете ли вы решить уравнение Шредингера вида

$$i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \right] = (p \sin \omega t + q \cos \omega t) |\psi(t)\rangle ?$$

1.6. Показать, что $\left[\int_0^t H(t') dt', H(t) \right] = 0$, если $H(t) = (p +$

$+ q) f(t)$, где $f(t)$ — любая непрерывная функция времени, а операторы q и p эрмитовы и удовлетворяют соотношению $[q, p] = i\hbar$.

Сопоставьте этот результат с результатом задачи 1.5 и решите уравнение Шредингера $(p + q) f(t) | \psi(t) \rangle = i\hbar [\partial | \psi(t) \rangle / \partial t]$.

1.7. Пусть A_S, B_S, C_S и D_S — наблюдаемые величины в представлении Шредингера, удовлетворяющие уравнению

$$A_S = B_S C_S + D_S.$$

Преобразовать это уравнение к гейзенберговской картине.

1.8. Доказать, что как для скобок Пуассона, так и для коммутаторов справедливы следующие свойства:

- a) $\{u, v\} = -\{v, u\}$,
- b) $\{u, c\} = 0$, где c — постоянная,
- c) $\{u_1 + u_2, v\} = \{u_1, v\} + \{u_2, v\}$,
- d) $\{u, v_1 + v_2\} = \{u, v_1\} + \{u, v_2\}$,
- e) $\{u_1 u_2, v\} = \{u_1, v\} u_2 + u_1 \{u_2, v\}$,
- f) $\{u, v_1 v_2\} = \{u, v_1\} v_2 + v_1 \{u, v_2\}$,
- g) $\{u, \{v, w\}\} + \{v, \{w, u\}\} + \{w, \{u, v\}\} = 0$.

Здесь операторы u, v и w являются функциями операторов p и q .

1.9. Доказать, что соотношения коммутации имеют одинаковый вид в представлении Гейзенберга и в представлении взаимодействия.

1.10. Рассмотрим две некоммутирующие наблюдаемые величины q и N . Собственные значения величины q непрерывны и пробегают все значения от $-\infty$ до $+\infty$, в то время как собственными значениями величины N являются все положительные целые числа и нуль. Очевидно, имеем $q | q' \rangle = q' | q' \rangle$ и $N | n \rangle = n | n \rangle$. Разложим формально некоторые из собственных кет-векторов $| q' \rangle$ по полной системе $\{| n \rangle\}$, а некоторые собственные кет-векторы $| n \rangle$ — по полной системе $\{| q' \rangle\}$. Показать, что функция преобразования между этими двумя представлениями является унитарной функцией.

1.11. Вычислить след операторов $|\psi\rangle\langle\psi|$ и $|\chi\rangle\langle\chi|$, если $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$ — два кет-вектора с конечной нормой. Показать, что след (O) , где O является произвольным оператором, не зависит от типа используемого представления.

1.12. Пусть A есть эрмитов оператор, удовлетворяющий уравнению

$$f(A) = (A - a_1)(A - a_2)(A - a_3) = 0,$$

где a_1, a_2, a_3 — вещественные числа и никакие два из них не равны друг другу. Показать, что величина A является наблюдаемой величиной. Найти собственные значения оператора A и выразить произвольный кет-вектор в виде линейной суперпозиции собственных векторов этого оператора (действовать так же, как и при выводе формулы (1.38)). Выразить кет-вектор $|\psi\rangle$, оператор A и собственные кет-векторы этого оператора в виде матриц в A -представлении.

1.13. Рассмотрим электронный пучок с энергией в 100 эв, движущийся в направлении x . Положение этого пучка в направлении оси y измеряется при его прохождении через щель, имеющую ширину в направлении оси y , равную 0,01 м. С помощью принципа неопределенностей определить ширину, которую пучок будет иметь после прохождения щели на расстоянии в 1 м и в 100 м от щели.

1.14. Пусть A и B — два некоммутирующих оператора. Показать, что $\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA)$ при условии, что следы существуют.

ПРОСТЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

2.1. Введение

Гармонический осциллятор занимает центральное положение в квантовой теории электромагнитных полей. Квантовые свойства электромагнитных волн стали особенно важными в связи с созданием усилителей в оптической области (оптических мазеров). Осциллятор играет большую роль в квантовой теории колебаний кристаллической решетки твердых тел (фононов), а также в квантовой электродинамике. В первую очередь мы рассмотрим электромагнитное поле, а в дальнейшем при изучении модели аттенюатора мы воспользуемся квантовой теорией колебаний кристаллической решетки (фононов). В силу того, что осциллятор является простым примером динамической системы с классическим аналогом, иллюстрирующим изложенную в предыдущей главе общую теорию, его изучению будет посвящена первая часть этой главы.

Другая простая динамическая система — спиновый момент электрона — не имеет классического аналога. Его изучению будет посвящена вторая часть настоящей главы. Спин электрона играет важнейшую роль во многих областях физики, однако нашей основной целью является его описание в более или менее феноменологической модели лазера. Анализ спиновой системы позволит также показать, как строится квантовая теория системы, не имеющей классического аналога. Строгое рассмотрение электронного спина основано на релятивистской квантовой механике Дирака [1, 4]. Мы же ограничимся лишь нерелятивистской теорией Паули.

Третья часть настоящей главы посвящается взаимодействию электрона с электромагнитным полем. Гл. V

содержит более детальное обсуждение взаимодействия излучения с атомами в случае квантованного электромагнитного поля.

Изучение осциллятора мы начнем с гейзенберговской картины. Как показано в разделе 1.16, гейзенберговские уравнения движения тождественны по форме классическим уравнениям движения, так что гейзенберговская картина дает формальную аналогию между классическим и квантовым осцилляторами. Эта картина дает также возможность очень просто ввести удобные для расчетов операторы рождения и уничтожения. Эти операторы используются в разделе 2.3 для решения задачи о собственных значениях энергии и собственных векторах осциллятора в энергетическом представлении. Эти операторы играют также решающую роль в теории квантованного поля излучения.

В разделе 2.4 мы даем физическую интерпретацию операторов рождения и уничтожения, хотя для более точной их интерпретации нужно знать свойства симметрии волновых функций, описывающих систему осцилляторов и бозонов. Ради простоты мы изложим упрощенный вариант теории, а за более строгим изложением теории отсылаем читателя к более полным и подробным учебникам [1, 4, 10]. В том же разделе мы введем операторы, описывающие фермионы. В этом случае строгая интерпретация теории содержит в себе и вопросы вторичного квантования [1, 4, 10], которых мы не будем касаться в данной книге. Однако, как будет показано во второй части настоящей главы, операторы, описывающие спин электрона, можно представить в форме, аналогичной форме фермионных операторов. Поэтому краткое изложение этих вопросов будет весьма полезным.

В разделе 1.11 были введены собственные значения и собственные векторы координат и импульсов одномерной частицы, которые не зависели от вида потенциала $V(q)$. Следовательно, нам уже известны собственные векторы координаты и импульса осциллятора. В последнем разделе первой части мы дадим примеры полученных в разделе 2.3 энергетических базисных векторов в координатном представлении. На языке волновой механики они называются энергетическими собственными функциями осциллятора.

В разделе 1.19 мы рассмотрели развитие во времени волнового пакета с минимальной неопределенностью для свободной частицы. В гл. III нами будут развиты значительно более мощные математические методы оперирования с волновыми пакетами. Волновые пакеты с минимальной неопределенностью для осциллятора будут играть очень важную роль при дальнейшем рассмотрении электромагнитных полей в линиях связи. Эти вопросы мы будем изучать несколько позднее в других главах.

Во второй части данной главы мы введем эрмитовы операторы, описывающие спин электрона. Нерелятивистская теория спина основывается главным образом на интуиции (в отличие от релятивистской дираковской теории [1, 4], в которой спин появляется автоматически). В целях обоснования введения спина в нерелятивистской теории мы очень кратко изложим квантовую теорию углового момента, Коммутационные соотношения для оператора углового момента будут использоваться нами и для спина. Но для согласования теоретических значений спина с экспериментальными потребуются дополнительные ограничения. Мы дадим также физическую интерпретацию оператора спина на основе операторов рождения и уничтожения фермионов.

В последнем разделе второй части мы рассмотрим поведение электронного спина в постоянном магнитном поле и обсудим роль оператора спина в гейзенберговском представлении. Последнее будет полезно для дальнейшего.

В третьей части будет рассмотрен нерелятивистский гамильтониан электрона в неквантованном электромагнитном поле.

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

2.2. Осциллятор в гейзенберговском представлении

Рассмотрим классический одномерный гармонический осциллятор единичной массы, описываемый координатой q и импульсом p . Его функция гамильтона имеет вид

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2), \quad (2.1)$$

где константа ω^2 связана с упругой силой, действующей на частицу. Как известно (см. (1.229)), классические

уравнения движения в гамильтоновской форме имеют вид

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad (2.2a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial q} = - \omega^2 q. \quad (2.2b)$$

Обычно эти уравнения сводятся к одному уравнению второго порядка. Для этого обе части соотношения (2.2a) дифференцируют по t и затем с помощью равенства (2.2b) исключают член с dp/dt . Таким образом получается уравнение

$$\frac{d^2 q}{dt^2} = - \omega^2 q, \quad (2.3)$$

имеющее решение

$$q(t) = A \cos \omega t + B \sin \omega t, \quad (2.4a)$$

где A и B — постоянные. Подставляя это решение в (2.2a), получим

$$p(t) = - \omega A \sin \omega t + \omega B \cos \omega t. \quad (2.4b)$$

Если при $t = 0$, q равно $q(0)$ и p равно $p(0)$, то можно выразить A и B через $q(0)$ и $p(0)$ и получить следующие выражения для $p(t)$ и $q(t)$:

$$q(t) = q(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{\omega} \sin \omega t, \quad (2.5)$$

$$p(t) = - \omega q(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t.$$

Широко известен другой способ решения системы (2.2a), (2.2b) (см. [11, 12]).

Умножим обе части уравнения (2.2a) на $\sqrt{\omega/2}$, а обе части уравнения (2.2b) на $\pm i (\sqrt{2}\omega)^{-1}$ и сложим полученные выражения. В результате получим два сопряженных уравнения:

$$\frac{da}{dt} = - i \omega a, \quad (2.6a)$$

$$\frac{da^*}{dt} = i \omega a^*, \quad (2.6b)$$

где введены обозначения:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega q + ip), \quad a^* = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (\omega q - ip). \quad (2.7a)$$

Таким образом, a и a^* — комплексно сопряженные величины. Соотношения (2.7a) легко разрешаются относительно p и q :

$$q = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} (a^* + a), \quad p = i \sqrt{\frac{\omega}{2}} (a^* - a), \quad (2.7b)$$

Решения уравнений (2.6a) и (2.6b) имеют вид

$$a(t) = a(0) e^{-i\omega t} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\omega}} [\omega q(0) + ip(0)] e^{-i\omega t}, \quad (2.8)$$

$$a^*(t) = a^*(0) e^{i\omega t} = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} [\omega q(0) - ip(0)] e^{i\omega t}.$$

Введение переменных a и a^* упрощает и без того простое решение уравнений.

Функцию Гамильтона (2.1) с помощью (2.7) можно выразить через величины a и a^* . После небольших преобразований для функции Гамильтона получим следующее выражение:

$$H = \omega a^* a, \quad (2.9)$$

которое выглядит еще проще, чем в переменных p и q .

Формально уравнения (2.6) можно получить непосредственно из гамильтониана (2.9), если уравнения движения в гамильтоновой форме взять в виде

$$i \frac{da}{dt} = \frac{\partial H}{\partial a^*} = \omega a, \quad i \frac{da^*}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial a} = - \omega a^*. \quad (2.10)$$

Исследуемый осциллятор имеет одну степень свободы и один нормальный тип колебаний. Пирс называет переменную a (или a^*) амплитудой нормального типа колебаний [см. 11, 12]. Вернемся к квантовой трактовке осциллятора в гейзенберговской картине. Согласно общей теории, изложенной в гл. I, с переменными q , p и H связаны эрмитовы операторы. При этом постулировалось, что опе-

раторы q и p удовлетворяют коммутационным соотношениям (1.117):

$$[q, p] = i\hbar. \quad (2.11)$$

Гамильтониан осциллятора имеет вид

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2) = H^+. \quad (2.12)$$

Все эти операторы рассматриваются в шредингеровском представлении и, следовательно, не зависят явно от времени. Шредингеровское уравнение движения (1.199) имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle, \quad (2.13)$$

и, в соответствии с (1.200) и (1.201), его решением будет

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, 0) |\psi_H(0)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |\psi_H(0)\rangle, \quad (2.14)$$

где U — унитарный оператор. Векторы состояний в шредингеровском и гейзенберговском представлениях связаны между собой законом преобразования (1.214). Операторы в обоих представлениях связаны между собой преобразованием подобия (1.216), так что

$$q_H(t) = U^+(t, 0) q_S U(t, 0), \quad p_H(t) = U^+(t, 0) p_S U(t, 0). \quad (2.15)$$

Как было показано в разделе 1.16, для консервативной системы гамильтониан имеет один и тот же вид в обоих представлениях, т. е.

$$H_H = \frac{1}{2} [p_H^2(t) + \omega^2 q_H^2(t)]. \quad (2.16)$$

Следовательно, гейзенберговские уравнения движения согласно (1.228) имеют вид

$$\frac{dq_H}{dt} = \frac{\partial H_H}{\partial p_H} = p_H, \quad (2.17a)$$

$$\frac{dp_H}{dt} = -\frac{\partial H_H}{\partial q_H} = -\omega^2 q_H. \quad (2.17b)$$

Единственная разница между этими уравнениями и классическими уравнениями (2.2) — это операторный характер переменных q_H и p_H , которые удовлетворяют равенству

$$[q_H(t), p_H(t)] = i\hbar. \quad (2.18)$$

Решение системы (2.17), в соответствии с (2.5), имеет вид

$$q_H(t) = U^+(t, 0) q_S U(t, 0) = q_S \cos \omega t + \frac{p_S}{\omega} \sin \omega t, \quad (2.19)$$

$$p_H(t) = U^+(t, 0) p_S U(t, 0) = -\omega q_S \sin \omega t + p_S \cos \omega t,$$

где q_S и p_S — операторы в шредингеровском представлении при $t = 0$. Начальные условия в классическом смысле, которые были использованы в соотношениях (2.5), теперь уже не имеют места. Так как оператор $U(t, 0) = \exp[-i(p_S^2 + \omega^2 q_S^2)t/2\hbar]$, то соотношения (2.19) показывают как влияет перестановка U относительно q_S и p_S . В следующей главе мы дадим другие методы вычисления U^+qU и U^+pU .

По аналогии с соотношением (2.7) мы теперь можем ввести два удобных неэрмитовых оператора a и a^+ , определяемых соотношениями

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega q + ip), \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega q - ip) \quad (2.20a)$$

или

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(a^+ + a), \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(a^+ - a). \quad (2.20b)$$

По причинам, которые станут ясными впоследствии, оператор a называют оператором уничтожения, а оператор a^+ — оператором рождения.

Операторы a и a^+ , подобно операторам q и p , не коммутируют друг с другом. Если соотношения (2.20a) подставить в формулы (2.11) и использовать то обстоятельство, что всякий оператор коммутирует сам с собой, то получим правило коммутации операторов a и a^+ :

$$[a, a^+] = 1. \quad (2.21)$$

Подставляя формулы (2.20а) в выражение (2.12) для гамильтониана и используя правило коммутации, получаем следующее выражение для гамильтониана:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (aa^+ + a^+a) = \hbar\omega \left(a^+a + \frac{1}{2} \right). \quad (2.22)$$

Это выражение отличается от (2.9), так как операторы a и a^+ , в отличие от своих классических аналогов, теперь не коммутируют друг с другом. Член $\hbar\omega / 2$ называется нулевой энергией осциллятора.

В дальнейшем нам понадобятся следующие правила коммутации:

$$[a, a^+a] = a, \quad [a^+, a^+a] = -a^+, \quad (2.23)$$

которые легко вывести из соотношений коммутации (2.21).

Гейзенберговские уравнения (1.218) применимы как к эрмитовым, так и к неэрмитовым операторам. Поэтому уравнения движения для $a_H(t)$ и $a_H^\dagger(t)$ принимают вид

$$\begin{aligned} \frac{da_H}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [a_H, H_H] = -i\omega a_H, \\ \frac{da_H^\dagger}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [a_H^\dagger, H_H] = +i\omega a_H^\dagger. \end{aligned} \quad (2.24)$$

При выводе этих уравнений мы использовали соотношения (2.22) и (2.23), которые одинаково справедливы в шредингеровском и гейзенберговском представлениях. Решениями уравнений (2.24) являются выражения

$$\begin{aligned} a_H(t) &= U^\dagger(t, 0) a_S U(t, 0) = a_S e^{-i\omega t}, \\ a_H^\dagger(t) &= U^\dagger(t, 0) a_S^\dagger U(t, 0) = a_S^\dagger e^{i\omega t}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

для получения которых следует воспользоваться формулами (1.216). Оператор $U(t, 0)$ определяется соотношением

$$U(t, 0) = \exp(-i\omega t a_S^\dagger a_S) \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right), \quad (2.26)$$

где a_S и a_S^\dagger — операторы уничтожения и рождения в шредингеровском представлении. В дальнейшем будем использовать для любого оператора O обозначение $O(t)$ для

его гейзенберговского представления и обозначение O для его шредингеровского представления вместо индексов H и S .

Эрмитов оператор a^+a встречается столь часто, что следует ввести специальное обозначение:

$$N = a^+a = N^+. \quad (2.27)$$

Этот оператор называют оператором числа частиц. Происхождение этого названия будет понятно из дальнейшего. С помощью оператора N соотношения (2.23) можно записать в виде

$$Na = a(N - 1), \quad (2.28a)$$

$$Na^+ = a^+(N + 1). \quad (2.28b)$$

Оператор N и гамильтониан H связаны соотношением

$$N = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}. \quad (2.29)$$

Эти результаты указывают на глубокую аналогию между классической и квантовой теориями осциллятора.

2.3. Задача о собственных значениях энергии осциллятора

Согласно физической интерпретации квантовой механики собственные значения энергии являются теми величинами, которые получаются в экспериментах по измерению энергии. Таким образом, для сравнения теории с экспериментом необходимо решить уравнение

$$H |E\rangle = E |E\rangle \quad (2.30)$$

и определить собственные значения E оператора H . Ввиду простой связи N и H , выражаемой соотношением (2.29), эта задача полностью эквивалентна задаче о собственных значениях оператора N :

$$N |n'\rangle = n' |n'\rangle. \quad (2.31)$$

Так как величины H и N являются наблюдаемыми, то собственные векторы $\{|n'\rangle\}$ образуют полную ортогональную систему базисных векторов в N -представлении.

Для решения уравнения (2.31) напомним кратко решение задачи о собственных значениях операторов координаты и импульса, изложенное в разделе 1.11. Там был введен оператор смещения, который, действуя на известный собственный кет-вектор $\{|n'\rangle\}$, образует другой собственный кет-вектор. Покажем, что операторы a и a^+ образуют новые собственные кет-векторы из известного собственного кет-вектора, подобно тому как оператор смещения преобразует собственные кет-векторы p и q .

Будем предполагать, что кет-вектор $|n'\rangle$ есть известный собственный кет-вектор оператора N с собственным значением n' , который удовлетворяет уравнению (2.31). Пусть теперь обе стороны операторного равенства (2.28a) действуют на кет-вектор $|n'\rangle$. Тогда с помощью уравнения (2.31) нетрудно получить, что

$$N \{a |n'\rangle\} = (n' - 1) \{a |n'\rangle\}.$$

Аналогично этому из равенства (2.28b) получается соотношение

$$N \{a^+ |n'\rangle\} = (n' + 1) \{a^+ |n'\rangle\}.$$

Эти равенства показывают, что если кет-вектор $|n'\rangle$ является собственным кет-вектором оператора N с собственным значением n' , то кет-вектор $a |n'\rangle$ также является собственным кет-вектором того же оператора N , но с собственным значением $(n' - 1)$, а кет-вектор $a^+ |n'\rangle$ — собственным кет-вектором оператора N с собственным значением $(n' + 1)$. Таким образом, из собственного кет-вектора $|n'\rangle$ мы можем образовать еще два собственных кет-вектора.

Этот процесс можно повторить дальше. Для этого достаточно применить операторное равенство (2.28a) к кет-вектору $a |n'\rangle$ и, используя предыдущий результат, образовать новый кет-вектор $a^2 |n'\rangle$ с собственным значением $(n' - 2)$. Аналогично, применяя (2.28b) к кет-вектору $a^+ |n'\rangle$, можно образовать кет-вектор $a^{+2} |n'\rangle$ с собственным значением $(n' + 2)$. Очевидно, этот процесс можно продолжать до бесконечности. В результате мы можем из одного-единственного кет-вектора образовать бесконечную систему кет-векторов и собственных

значений. Ее можно записать в виде

$$|n'\rangle, a|n'\rangle, a^2|n'\rangle, \dots, \quad (2.32a)$$

$$n', n' - 1, n' - 2, \dots, \\ |n'\rangle, a^+|n'\rangle, a^{+2}|n'\rangle, \dots, \quad (2.32b)$$

$$n', n' + 1, n' + 2, \dots$$

Заметим, что в этих последовательностях соседние собственные значения отличаются на единицу.

Теперь мы покажем, что величина n' может быть лишь целым положительным числом или нулем.

Так как оператор N эрмитов, то из общей теории первой главы следует, что величина n' действительна и норма любого вектора состояния больше нуля или равна нулю. Если норма равна нулю, то и сам вектор равен нулю. Таким образом, для любого кет-вектора $|n'\rangle$

$$\langle n' | n' \rangle > 0,$$

ибо равенство $|n'\rangle = 0$ тривиально. Умножим скалярно уравнение (2.31) на $\langle n' |$:

$$\langle n' | N | n' \rangle = \langle n' | a^+ a | n' \rangle = n' \langle n' | n' \rangle. \quad (2.33)$$

Но это есть не что иное, как норма вектора $a|n'\rangle$, которая должна быть больше нуля или равна нулю. Так как $\langle n' | n' \rangle > 0$ и $\langle n' | a^+ a | n' \rangle \geq 0$, то из (2.33) следует, что $n' \geq 0$. Таким образом, собственные значения оператора N действительны и неотрицательны. Если $n' = 0$, то

$$a | 0 \rangle = 0, \quad (2.34)$$

ибо согласно (2.33) норма этого вектора равна нулю.

Если $n' \neq 0$, то норма вектора $a|n'\rangle$ определяется соотношением (2.33). Однако если n' не есть целое число, то собственные значения последовательности (2.32a) могут стать отрицательными, так же как и нормы соответствующих векторов состояний. А этого не должно быть. Единственный способ избежать этого — разрешить числам n' принимать только целые положительные или равные нулю значения. Таким образом, собственные значения оператора N могут быть целыми положительными числами или равными нулю.

С помощью условия (2.21) для нормы вектора $a^+ |n\rangle$ получаем следующее выражение:

$$\langle a | a a^+ | n \rangle = \langle n | (1 + a^+ a) | n \rangle = (1 + n) \langle n | n \rangle. \quad (2.35)$$

Отсюда следует, что вектор $a^+ |n\rangle$ никогда не обращается в нуль, так как $n \geq 0$ и $\langle n | n \rangle > 0$.

До сих пор кет-векторы, образованные последовательным применением операторов a и a^+ , не были еще нормированы. Это можно сделать следующим образом. Так как вектор $a |n\rangle$ есть кет-вектор оператора N с собственным значением $(n - 1)$, то можно предположить, что вектор $a |n\rangle$ отличается от вектора $|n - 1\rangle$ лишь на постоянный множитель:

$$a |n\rangle = c_n |n - 1\rangle. \quad (2.36)$$

Согласно условию (2.33) норма вектора $a |n\rangle$ равна

$$\langle n | a^+ a | n \rangle = n \langle n | n \rangle = |c_n|^2 \langle n - 1 | n - 1 \rangle.$$

Если $\langle n - 1 | n - 1 \rangle$ равно единице, то $\langle n | n \rangle$ также будет равно единице. Это возможно только в том случае, если положить $|c_n| = \sqrt{n}$. Фаза c_n произвольна, и ее можно положить равной нулю. В результате уравнение (2.36) принимает следующий вид:

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle. \quad (2.37)$$

В этом равенстве мы ограничиваемся значениями n большими нуля, ибо состояние $| - 1 \rangle$ не имеет смысла. Если же $n = 0$, то уравнения (2.37) приводит к равенству (2.34).

Аналогично, исходя из соотношения (2.35), можно написать

$$a^+ |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle. \quad (2.38)$$

Следовательно, если величина $\langle 0 | 0 \rangle$ равна единице, то и все остальные состояния будут нормированы на единицу.

Приводим сводку этих важных результатов:

$$N |n\rangle = n |n\rangle, \quad a |0\rangle = 0, \quad (2.39)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n - 1\rangle, \quad a^+ |n\rangle = \sqrt{n + 1} |n + 1\rangle.$$

Если n раз применить оператор a^+ к состоянию $|0\rangle$, то, используя (2.38), получим очень важный результат:

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle. \quad (2.40)$$

В дальнейшем эта формула будет нами неоднократно использована.

Из общей теории следуют ортонормированность состояний

$$\langle n' | n'' \rangle = \delta_{n'n''} \quad (2.41)$$

и соотношение полноты

$$\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = I. \quad (2.42)$$

Так как эти векторы имеют конечную норму, то они образуют полный набор базисных векторов в гильбертовом пространстве.

Для того чтобы получить матричные элементы операторов a , a^+ и N в N -представлении, воспользуемся соотношениями (2.39) и (2.41). Легко видеть, что они приводят к равенствам

$$\langle n' | a | 0 \rangle = 0, \quad \langle n' | a | n'' \rangle = \sqrt{n''} \delta_{n', n''-1}, \quad (2.43)$$

$$\langle n' | a^+ | n'' \rangle = \sqrt{n'' + 1} \delta_{n', n''+1}, \quad \langle n' | N | n'' \rangle = n'' \delta_{n'n''}.$$

Собственные значения энергии равны

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.44)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$

В классической механике при измерениях энергии можно получить для нее любое положительное значение. В квантовой же механике эти значения энергии могут быть дискретны. При больших n (n называется квантовым числом) дискретный характер энергии (2.44) становится незаметным и квантовые соотношения переходят в классические.

2.4. Физическая интерпретация операторов N , a и a^+ . Бозоны и фермионы

Операторы q , p и H имеют простой физический смысл, а именно: они являются соответственно операторами положения, импульса и энергии. Операторы a , a^+ и $a^+ a$ определялись через операторы q , p и H , но прямого физического смысла они не имеют.

На рис. 4 показана схема энергетических уровней квантованного осциллятора. Каждому уровню соответ-

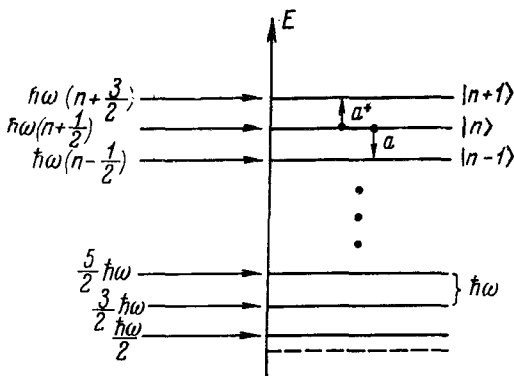


Рис. 4. Диаграмма энергетических уровней квантованного гармонического осциллятора.

ствует собственное состояние оператора N . Если энергетическое состояние осциллятора описывается кет-вектором $|n\rangle$, то оно обозначается кружочком на уровне $(n + 1/2) \hbar\omega$. Состояние осциллятора в этом случае определяется величиной n и расстоянием между уровнями $\hbar\omega$.

Не приводит к противоречию и другая интерпретация состояния $|n\rangle$ осциллятора. Можно считать, что гамильтониан описывает систему из n тождественных невзаимодействующих квантов, причем все они находятся в одинаковых динамических состояниях с энергией $\hbar\omega$. Таким образом, состояние $|n\rangle$ можно интерпретировать как состояние с n квантами. Тогда состояние $|0\rangle$ не содержит квантов и называется состоянием вакуума.

Строгое обоснование такой интерпретации было дано Дираком [1]. Поэтому мы не будем обсуждать его в этой книге. Эта интерпретация представляет собой одно из фундаментальнейших следствий квантовой теории, ибо она позволяет объединить волновые и корпускулярные свойства света. В последнем случае кванты называются фотонами. Значительную часть этой книги мы посвятим изучению квантовых свойств света, особенно дуализму волна — частица.

Оператор N называется оператором числа частиц, поскольку измерение N дает одно из его собственных значений $0, 1, \dots, \infty$, каждое из которых рассматривается как число квантов в волне. Согласно этой интерпретации, в одном и том же динамическом состоянии может находиться произвольное число квантов. Частицы, обладающие таким свойством, называются бозонами. Кванты света (фотоны), кванты упругих колебаний в кристалле (фононы), α -частицы и некоторые другие частицы являются бозонами.

Теперь легко видеть, почему операторы a^+ и a могут рассматриваться, соответственно, как операторы рождения и уничтожения. Согласно соотношению (2.38), если на осциллятор, находящийся в состоянии $|n\rangle$ с n квантами, подействовать оператором a^+ , то получится состояние $|n+1\rangle$ с $n+1$ квантами. Это видно из рис. 4. Следовательно, a^+ является оператором рождения (или оператором, увеличивающим число частиц). Аналогично, согласно соотношению (2.37), если оператор a действует на состояние $|n\rangle$, то возникает состояние $|n-1\rangle$ с $n-1$ квантами, и поэтому a называется оператором уничтожения (или оператором, уменьшающим число частиц).

Так как собственные значения оператора N следуют непосредственно из коммутационного соотношения $[a, a^+] = 1$, то частицы, подчиняющиеся этому соотношению, являются бозонами.

В природе существует другой класс частиц, которые называются фермионами и которые обладают тем свойством, что никакие две из них не могут находиться в одинаковом динамическом состоянии. Примерами фермионов являются электроны, протоны и нейтроны. Фермионы подчиняются принципу Паули, который гласит: две оди-

наковые частицы не могут находиться в одном и том же динамическом состоянии. Следовательно, фундаментальное утверждение квантовой механики $[a, a^+] = 1$ непригодно для фермионов. Хотя полная теория фермионов включает в себя теорию вторичного квантования, можно дать сверхупрощенный вариант этой теории, в котором квантование производится способом, впервые предложенным Иорданом и Вигнером [4]. Этот способ устраняет трудность, связанную с наличием многократно занятых состояний.

В теории вторичного квантования систем с единственным динамическим состоянием также имеются операторы b и b^+ , рассматриваемые как операторы уничтожения и рождения фермионов. Однако, в отличие от a и a^+ в случае бозонов, эти операторы никак не связаны с импульсом или координатой фермиона. Существует также оператор $N = b^+b = N^+$, рассматриваемый как оператор числа фермионов и связанный с гамильтонианом фермионов соотношением

$$H = Eb^+b, \quad (2.45a)$$

где E — собственное значение энергии одного динамического состояния системы. Иордан и Вигнер постулируют, что b и b^+ подчиняются соотношениям антикоммутации

$$\{b, b\} = 0, \quad \{b^+, b^+\} = 0, \quad (2.45b)$$

$$\{b, b^+\} = 1, \quad (2.46)$$

а не соотношениям коммутации. Антиккоммутатором операторов A и B называется оператор

$$\{A, B\} \equiv AB + BA. \quad (2.47)$$

Таким образом, согласно условиям (2.45) имеем

$$b^2 = b^{+2} = 0. \quad (2.48)$$

Найдем собственные значения оператора N . Из выражений (2.46) и (2.48) следует, что

$$N^2 = b^+bb^+b = b^+(1 - b^+b)b = b^+b = N. \quad (2.49)$$

Этого простого алгебраического соотношения достаточно для определения собственных значений N . Действительно, если

$$N |n\rangle = n |n\rangle, \quad (2.50)$$

то согласно соотношению (2.49) получаем уравнение вида

$$n^2 |n\rangle = N^2 |n\rangle = N |n\rangle = n |n\rangle, \quad (2.51)$$

откуда следует, что

$$n^2 = n, \quad \text{или} \quad n = 1; 0. \quad (2.52)$$

Так как мы предполагаем, что в системе отсутствует вырождение, то гильбертово пространство будет образовано только двумя векторами, которые мы обозначим $|0\rangle$ и $|1\rangle$.

В соответствии с общей теорией собственные кет-векторы оператора N удовлетворяют соотношениям ортонормировки и полноты, которые принимают в нашем случае вид

$$\langle 1 | 1 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1, \quad \langle 1 | 0 \rangle = \langle 0 | 1 \rangle = 0, \quad (2.53)$$

$$|1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 0| = I,$$

где

$$N |1\rangle = |1\rangle, \quad N |0\rangle = 0. \quad (2.54)$$

Отсюда можно вывести матричные элементы оператора N :

$$N = \begin{bmatrix} \langle 1 | N | 1 \rangle & \langle 1 | N | 0 \rangle \\ \langle 0 | N | 1 \rangle & \langle 0 | N | 0 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.55)$$

Из соотношений (2.53) и (2.54) следует также, что

$$N = |1\rangle\langle 1|. \quad (2.56)$$

Так как собственные значения N равны 1 или 0, то состояние может быть или занято одной частицей, или быть пустым. Последнее утверждение согласуется с известным принципом Паули. Таким образом, предположение Иордана и Вигнера оказывается вполне достаточным для того, чтобы обеспечить требование, что каждое динамическое состояние может быть занято только одной частицей.

Теперь мы должны показать, что операторы b^+ и b действуют как операторы рождения и уничтожения. Иными словами, если мы действуем на состояние $|0\rangle$ оператором b^+ , то получаем состояние $|1\rangle$, и, следовательно, оператор b^+ действительно является оператором рождения. Согласно условию (2.48) $b^{+2} = 0$, и поэтому из наших рассмотрений автоматически исключаются состояния

$b^{+2} | 0 \rangle$ с появлением одновременно двух частиц. Аналогично, выражение $b | 1 \rangle$ дает состояние $| 0 \rangle$ с отсутствием частиц вообще, и, следовательно, b является оператором уничтожения; соответственно $b^2 | 1 \rangle = 0$.

Для доказательства этих утверждений воспользуемся коммутационными соотношениями между операторами b , b^+ и $N = b^+b$:

$$[b, N] = b, \quad [b^+, N] = -b^+. \quad (2.57)$$

Их можно вывести из соотношений (2.46) и (2.48). По форме они похожи на соотношения (2.28) для бозонов.

Как и в случае бозонов, покажем, что оператор b , действуя на состояние $| n \rangle$,

$$b | n \rangle = c_n | 1 - n \rangle, \quad (2.58a)$$

порождает собственный кет-вектор оператора N с собственным значением $1 - n$. В противоположность случаю с бозонами, ряд на этом обрывается, так как $b^2 | n \rangle = 0$ в силу соотношения (2.48). Норма этого состояния равна

$$\langle n | b^+ b | n \rangle = n \langle n | n \rangle = |c_n|^2 \langle 1 - n | 1 - n \rangle.$$

Таким образом, если $n = 0$, то

$$b | 0 \rangle = 0, \quad (2.58b)$$

если же $n = 1$, то в силу $\langle 0 | 0 \rangle = 1 = \langle 1 | 1 \rangle$

$$|c_1|^2 = 1.$$

Следовательно, при $n = 1$

$$b | 1 \rangle = | 0 \rangle, \quad (2.58c)$$

если величину c_1 считать действительной. Аналогично можно показать, что

$$b^+ | 0 \rangle = | 1 \rangle, \quad b^+ | 1 \rangle = 0. \quad (2.59)$$

Из соотношений (2.53), (2.58b), (2.58c) и (2.59) можно найти матричные элементы операторов b и b^+ в N -представлении:

$$b = \begin{bmatrix} \langle 1 | b | 1 \rangle & \langle 1 | b | 0 \rangle \\ \langle 0 | b | 1 \rangle & \langle 0 | b | 0 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.60a)$$

$$b^+ = \begin{bmatrix} \langle 1 | b^+ | 1 \rangle & \langle 1 | b^+ | 0 \rangle \\ \langle 0 | b^+ | 1 \rangle & \langle 0 | b^+ | 0 \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.60b)$$

Векторы состояний могут быть представлены матрицами

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} \langle 1|0\rangle \\ \langle 0|0\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} \langle 1|1\rangle \\ \langle 0|1\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.61)$$

Во второй части данной главы мы покажем, каким образом операторы спина можно представить как операторы уничтожения и рождения фермионов.

2.5. Функция преобразования от N -представления к q -представлению

Задача о собственных значениях энергии осциллятора в разделе 2.3 была решена нами в N -представлении. В некоторых случаях полезно использовать координатное представление. Для этого необходимо получить функцию преобразования $\langle q' | n \rangle$, являющуюся энергетической волновой функцией осциллятора. Такие функции преобразования являются представителями собственных кет-векторов $|n\rangle$ энергии в координатном представлении.

Функцию преобразования

$$u_n(q') \equiv \langle q' | n \rangle \quad (2.62)$$

можно найти двумя способами. Первый состоит в том, что задача о собственных значениях энергии записывается в виде

$$\frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2)|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle. \quad (2.63)$$

Если теперь уравнение (2.63) умножить скалярно на $\langle q' |$ и использовать соотношения (1.159) и (1.160), то получим

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dq'^2} + \frac{\omega^2}{2} q'^2\right) u_n(q') = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) u_n(q'). \quad (2.64)$$

Таким образом, функция преобразования является решением уравнения Шредингера (2.64). При этом предполагается, что полученное решение имеет конечную форму,

т. е. что интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} |u_n(q')|^2 dq'$ существует. Решение уравнения (2.64) можно найти в книге Шиффа [4].

Другой метод определения функции $u_n(q')$ состоит в том, что мы исходим из соотношения (2.34)

$$a | 0 \rangle = 0$$

и заменяем в нем оператор a на его выражение через операторы p и q с помощью формул (2.20а). Тогда получаем соотношение

$$(\omega q + ip) | 0 \rangle = 0.$$

Далее, умножая обе части этого равенства скалярно на бра-вектор $\langle q' |$ и используя соотношения (1.159) и (1.160), получим

$$\left(\omega q' + \hbar \frac{d}{dq'}\right) u_0(q') = 0.$$

Решение этого уравнения с условием нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |u_0(q')|^2 dq' = 1 \quad (2.65)$$

принимает вид

$$u_0(q') \equiv \langle q' | 0 \rangle = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\omega q'^2}{2\hbar}\right). \quad (2.66)$$

Это и есть координатное представление состояния вакуума, называемое другими словами волновой функцией основного состояния осциллятора.

Далее, в силу формул (2.38) и (2.20а) мы можем получить

$$\langle q' | a^+ | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \langle q' | \omega q - ip | 0 \rangle = \langle q' | 1 \rangle.$$

Отсюда, используя соотношения (1.159), (1.160) и (2.66), нетрудно получить формулу для $u_1(q')$:

$$\begin{aligned} u_1(q') \equiv \langle q' | 1 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \left(\omega q' - \hbar \frac{d}{dq'}\right) u_0(q') = \\ &= \left[\left(\frac{2\omega}{\hbar}\right)^2 \frac{\omega}{\pi \hbar}\right]^{1/4} q' \exp\left(-\frac{\omega}{2\hbar} q'^2\right). \end{aligned} \quad (2.67)$$

Легко проверить, что $\int_{-\infty}^{+\infty} |u_1|^2 dq' = 1$.

Аналогичным образом можно получить последовательно выражения для функций u_2, u_3, \dots . Окончательное выражение для функции $u_n(q')$ принимает тогда вид

$$\langle q' | n \rangle = u_n(q') = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2} H_n(\alpha q') e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 q'^2}, \quad (2.68)$$

где

$$\alpha = \sqrt{\omega/\hbar}$$

и $H_n(x)$ — полином Эрмита порядка n . Это и есть собственные кет-векторы $|n\rangle$ в координатном представлении. После того, как в следующей главе мы глубже разработаем технику обращения с операторами, мы выведем производящую функцию для $u_n(q')$.

2. СПИН ЭЛЕКТРОНА

2.6. Спиновый оператор Паули

Согласно общей формулировке квантовой механики, изложенной в первой главе, с каждой наблюдаемой величиной некоторой физической системы связан линейный эрмитов оператор. Алгебра таких операторов, содержащая правила коммутации или антикоммутации, строится так, чтобы все результаты согласовывались с экспериментом. В тех случаях, когда система не имеет классического аналога, выбор соответствующих постулатов в значительной мере является интуитивным.

Спиновый момент электрона (протона, нейтрона и др.) является экспериментально наблюдаемой величиной, которая не имеет классического аналога. Все попытки объяснить спин классически потерпели неудачу. В настоящем разделе будет изложена нерелятивистская теория спина, принадлежащая Паули.

Электрон обладает спиновым моментом \mathbf{s} , которому соответствует эрмитов оператор \mathbf{s} . Однако более удобным является оператор $\boldsymbol{\sigma}$, определяемый соотношением

$$\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.69)$$

Спин и оператор $\boldsymbol{\sigma}$ имеют три компоненты: σ_x, σ_y и σ_z . Мы будем обозначать x, y, z индексами 1, 2, 3*).

*) В некоторых случаях мы для краткости называем спшпом величину $\boldsymbol{\sigma}$.

Следующий шаг в квантовомеханическом описании спина состоит в постулировании коммутационных соотношений для операторов σ_i ($i = 1, 2, 3$). Для того чтобы каким-то образом обосновать введение и свойства этих операторов, рассмотрим кратко с классической и квантовомеханической точек зрения орбитальный угловой момент частицы.

Если \mathbf{r} — радиус-вектор частицы относительно некоторого начала координат, а \mathbf{p} — ее импульс, то классический угловой момент частицы определяется соотношением

$$\mathbf{l} = [\mathbf{r}\mathbf{p}] \quad (2.70a)$$

или, в проекциях, в виде

$$l_1 = q_2 p_3 - q_3 p_2, \quad l_2 = q_3 p_1 - q_1 p_3, \quad l_3 = q_1 p_2 - q_2 p_1, \quad (2.70b)$$

где $\mathbf{r} = (q_1, q_2, q_3)$ и $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3)$.

Если частица массы m несет заряд $|e|$, то с этим зарядом связан орбитальный магнитный момент [13]

$$m = -\frac{|e|\hbar}{2m} \mathbf{l} \quad (2.71)$$

в единицах МКС.

До сих пор мы рассматривали частицы, движущиеся в одном измерении, но обобщение на трехмерный случай очевидно. Для квантования трехмерного движения частицы постулируем (см. (1.117)) следующие коммутационные соотношения:

$$[q_i, q_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (2.72)$$

где $i, j = 1, 2$ или 3 . Таким образом, в квантовой механике, как и в классической, каждая степень свободы независима от других; только сопряженные переменные q_i и p_i , относящиеся к одной и той же степени свободы, не коммутируют между собой.

Коммутационные соотношения (2.72) дают возможность рассмотреть квантовомеханическое поведение оператора \mathbf{l} . Из условий (2.72) и определения (2.70) следует, что компоненты эрмитова оператора l_1, l_2 и l_3 удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$[l_1, l_2] = i\hbar l_3, \quad [l_2, l_3] = i\hbar l_1, \quad [l_3, l_1] = i\hbar l_2 \quad (2.73a)$$

или

$$[l_i, l_j] = i\hbar l_k, \quad (2.73b)$$

где индексы i, j и k получаются из индексов 1, 2, 3. Циклической перестановкой эти коммутационные соотношения вместе с определением полного углового момента

$$l^2 = l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 \quad (2.74)$$

определяют квантовые свойства углового момента [4]. Мы не будем производить полный анализ. Заметим только, что компоненты оператора l имеют собственные значения, равные целому или полуцелому числу \hbar . Так как из экспериментов известно, что собственные значения электронного спина равны $+\hbar/2$ или $-\hbar/2$, то можно предположить, что компоненты оператора s также удовлетворяют коммутационным соотношениям (2.73). Если оператор s выразить через оператор σ , то эти соотношения примут следующий вид:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\sigma_k, \quad (2.75)$$

где индексы i, j, k получаются из 1, 2, 3 четной перестановкой. Однако этого предположения недостаточно для того, чтобы оператор σ_z имел только два собственных значения $+1$ или -1 , как этого требует эксперимент ($s'_z = \pm \hbar/2$). Ниже мы покажем, что оператор σ_z будет иметь два собственных значения ± 1 только в том случае, когда дополнительно к условиям (2.75) мы подчиним его следующим антикоммутационным соотношениям:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}. \quad (2.76)$$

Перед этим мы сначала выведем из соотношений (2.75) и (2.76) некоторые полезные алгебраические свойства операторов σ_i . Если $i = j$, то согласно (2.76) имеем

$$\sigma_i^2 = I, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.77)$$

Следовательно, оператор, равный квадрату каждой компоненты оператора σ , является тождественным оператором.

Сложив выражения (2.75) и (2.76), получим (при $i \neq j$)

$$\sigma_i \sigma_j = \lambda i \sigma_k, \quad (2.78)$$

где индексы i, j и k получаются из 1, 2, 3 четной циклической перестановкой.

Введем теперь новые операторы σ_+ и σ_- :

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_1 \pm i\sigma_2), \quad \sigma_+ = \sigma_-^{\dagger}, \quad \sigma_- = \sigma_+^{\dagger}. \quad (2.79)$$

Они подчиняются следующим коммутационным и антикоммутационным соотношениям:

$$[\sigma_{\pm}, \sigma_1] = \pm \sigma_3, \quad (2.80a)$$

$$[\sigma_{\pm}, \sigma_2] = i\sigma_3, \quad (2.80b)$$

$$[\sigma_{\pm}, \sigma_3] = \mp 2\sigma_{\pm}, \quad (2.80c)$$

$$[\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_3, \quad (2.80d)$$

$$[\sigma_+, \sigma_+] = 0, \quad (2.80e)$$

$$[\sigma_-, \sigma_-] = 0, \quad (2.80f)$$

$$\{\sigma_{\pm}, \sigma_1\} = I, \quad (2.80g)$$

$$\{\sigma_{\pm}, \sigma_2\} = \pm iI, \quad (2.80h)$$

$$\{\sigma_{\pm}, \sigma_3\} = 0, \quad (2.80i)$$

$$\{\sigma_+, \sigma_-\} = I, \quad (2.80j)$$

$$\{\sigma_+, \sigma_+\} = 0, \quad (2.80k)$$

$$\{\sigma_-, \sigma_-\} = 0. \quad (2.80l)$$

Из условий (2.80k) и (2.80l) мы заключаем, что

$$\sigma_+^2 = 0, \quad \sigma_-^2 = 0. \quad (2.81)$$

Заметим, что все эти соотношения следуют из интуитивных предположений (2.75) и (2.76) и определения (2.79).

Теперь вернемся к задаче о собственных значениях операторов σ_i . Так как согласно (2.77) $\sigma_i^2 = I$, то задача сводится к задаче, уже решенной нами в разделе 1.6. Полученные там собственные значения были равны $+1$ и -1 . Таким образом, собственные значения операторов σ_1 , σ_2 и σ_3 равны ± 1 . Как и было обещано нами ранее, это утверждение получено из предположения (2.76). Теперь нужно выбрать удобное представление. Так как операторы σ_1 , σ_2 и σ_3 не коммутируют друг с другом, то они не могут быть диагональными в одном и том же представлении. Поэтому мы выберем представление, в котором оператор σ_3 диагонален. Как было указано в разделе 1.6 (см. соотношения (1.32)), базисные векторы этого

представления имеют вид $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$ и

$$\sigma_3 |1\rangle = |1\rangle, \quad \sigma_3 |-1\rangle = -1 |-1\rangle. \quad (2.82)$$

Кроме того, согласно соотношениям (1.37) матрица для оператора σ_3 имеет вид

$$\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.83)$$

Соотношения полноты и ортонормировки (см. (1.43), (1.33), (1.34)) имеют вид

$$\begin{aligned} | + 1 \rangle \langle + 1 | + | - 1 \rangle \langle - 1 | &= I, \\ \langle + 1 | + 1 \rangle &= \langle - 1 | - 1 \rangle = 1, \\ \langle + 1 | - 1 \rangle &= \langle - 1 | + 1 \rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Найдем теперь операторы σ_1 и σ_2 в представлении, в котором оператор σ_3 диагонален. Наиболее просто это сделать с помощью операторов σ_+ и σ_- . Из соотношений (2.80с) и (2.80i) следует, что

$$\sigma_+ \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_+ = -2\sigma_+, \quad (2.85a)$$

$$\sigma_+ \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_+ = 0, \quad (2.85b)$$

$$\sigma_- \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_- = 2\sigma_-, \quad (2.85c)$$

$$\sigma_- \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_- = 0. \quad (2.85d)$$

Если мы сложим равенства (2.85a) и (2.85b), то получим

$$\sigma_+ \sigma_3 = -\sigma_+. \quad (2.86)$$

Пусть обе стороны этого соотношения действуют на кет-вектор $|+1\rangle$. Тогда с учетом (2.82) мы можем получить равенство

$$\sigma_+ |+1\rangle = -\sigma_+ |+1\rangle,$$

которое может быть выполнено только в случае, если

$$\sigma_+ |+1\rangle = 0. \quad (2.87)$$

Аналогично, если мы сложим равенства (2.85c) и (2.85d) и подействуем полученным операторным равенством на кет-вектор $|-1\rangle$, то с учетом (2.82) получим

$$\sigma_- |-1\rangle = 0. \quad (2.88)$$

Подействуем теперь обеими частями равенства (2.85a) на кет-вектор $|-1\rangle$. Тогда с помощью (2.82) мы получим

$$\sigma_3 \{\sigma_+ |-1\rangle\} = +1 \{\sigma_+ |-1\rangle\}. \quad (2.89)$$

Отсюда следует, что $\sigma_+ |-1\rangle$ является собственным кет-вектором оператора σ_3 , соответствующим собственному значению $+1$, т. е. можно написать

$$\sigma_+ |-1\rangle = c_1 | +1\rangle, \quad (2.90)$$

где c_1 — некоторая константа. Подобным же образом из (2.85c) можно получить, что

$$\sigma_- | +1\rangle = c_2 |-1\rangle, \quad (2.91)$$

где c_2 — также константа. Теперь мы займемся определением постоянных c_1 и c_2 .

Для этого сложим равенства (2.80d) и (2.80j). Получим

$$\sigma_+ \sigma_- = \frac{1}{2} (1 + \sigma_3). \quad (2.92)$$

Если мы умножим это равенство справа на $| +1\rangle$, а слева на $\langle +1|$, то придем к соотношению

$$\langle +1 | \sigma_+ \sigma_- | +1\rangle = \frac{1}{2} \langle +1 | (1 + \sigma_3) | +1\rangle = 1, \quad (2.93)$$

в котором были учтены соотношения (2.82) и (2.84). Так как $\sigma_+ = \sigma_-^\dagger$, то норма вектора $\sigma_- | +1\rangle$, равная согласно (2.91) $|c_2|^2$, должна равняться 1. Таким образом, уравнение (2.91) можно переписать в виде

$$\sigma_- | +1\rangle = e^{i\alpha} |-1\rangle,$$

где α — действительное число. Эту фазу мы положим равной нулю. Тогда

$$\sigma_- | +1\rangle = |-1\rangle. \quad (2.94)$$

Далее, если мы вычтем из равенства (2.80d) равенство (2.80j), то получим

$$\sigma_- \sigma_+ = \frac{1}{2} (1 - \sigma_3), \quad (2.95)$$

действуя, как в предыдущем случае, найдем, что $|c_1|^2 = 1$, так что

$$\sigma_+ |-1\rangle = | +1\rangle. \quad (2.96)$$

Выпишем эти результаты (соотношения (2.87), (2.88), (2.94) и (2.96)):

$$\begin{aligned}\sigma_+ | + 1 \rangle &= 0, & \sigma_- | + 1 \rangle &= | - 1 \rangle, \\ \sigma_+ | - 1 \rangle &= | + 1 \rangle, & \sigma_- | - 1 \rangle &= 0.\end{aligned}\quad (2.97)$$

Воспользовавшись соотношениями ортонормировки (2.84), можно найти матричную форму операторов σ_+ и σ_- в представлении σ_3 :

$$\sigma_+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.\quad (2.98)$$

Отсюда и из определения (2.79) операторов σ_{\pm} следует матричная форма операторов σ_1 и σ_2 в представлении σ_3 :

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix},\quad (2.99)$$

и соотношения

$$\begin{aligned}\sigma_1 | + 1 \rangle &= | - 1 \rangle, & \sigma_2 | + 1 \rangle &= i | - 1 \rangle, \\ \sigma_1 | - 1 \rangle &= | + 1 \rangle, & \sigma_2 | - 1 \rangle &= (-i) | + 1 \rangle.\end{aligned}\quad (2.100)$$

Базисные векторы можно представить также в виде

$$| + 1 \rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad | - 1 \rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.\quad (2.101)$$

2.7. Энергия спина в магнитном поле

Как уже указывалось (см. (2.71)), частица массы m , несущая заряд $-|e|$ и обладающая орбитальным угловым моментом \mathbf{l} , имеет также и магнитный орбитальный момент \mathbf{m} , связанный с \mathbf{l} . Спиновый момент электрона \mathbf{s} связан с магнитным моментом $\boldsymbol{\mu}$ соотношением

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{|e|\hbar}{m} \mathbf{s} = -\frac{|e|\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \equiv -\beta \boldsymbol{\sigma},\quad (2.102)$$

где β — магнетон Бора. При одинаковых заряде $|e|$ и массе m спиновый магнитный момент вдвое больше орбитального магнитного момента. В релятивистской теории

электрона Дирака этот результат получается автоматически. Мы же примем этот результат как некоторый экспериментальный факт. В 1925 г. Гаудсмит и Уленбек выдвинули это предположение для объяснения экспериментально наблюдаемого расщепления спектральных линий в спектрах атомов щелочных металлов, подвергнутых действию магнитного поля.

Если электрон помещен в магнитное поле H , то энергия магнитного момента μ определяется формулой

$$H = - (\mu H) = \beta (\sigma H). \quad (2.103)$$

Если магнитное поле H_0 постоянно и направлено вдоль оси z , то

$$H = \beta H_0 \sigma_z = 2\beta H_0 \left(\sigma_+ \sigma_- - \frac{1}{2} \right), \quad (2.104)$$

так как оператор σ_z можно заменить с помощью соотношения (2.92). Поскольку собственные значения оператора σ_z равны ± 1 , собственные значения энергии равны $\pm \beta H_0$. Таким образом, спин имеет два энергетических уровня, разность энергий которых равна $2\beta H_0$. Эти два состояния соответствуют спиновому магнитному моменту, ориентированному параллельно и антипараллельно магнитному полю. Это свойство и отличает его от классического магнитного момента, который может быть ориентирован относительно поля H_0 произвольным образом.

Формально электронный спин в магнитном поле, аналогично гармоническому осциллятору, допускает и другую интерпретацию. Согласно (2.80) и (2.81) операторы σ_+ и σ_- удовлетворяют соотношениям

$$\{\sigma_+, \sigma_-\} = I, \quad \sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0. \quad (2.105)$$

Как было показано в разделе 2.4, операторы рождения и уничтожения фермионов (2.46) и (2.48) удовлетворяют тем же самым соотношениям

$$\{b^+, b\} = I, \quad b^{+2} = b^2 = 0. \quad (2.106)$$

Поэтому формально оператор σ_+ можно рассматривать как оператор рождения, а σ_- — как оператор уничтожения фермионов, обладающих единственным динамическим состоянием с энергией $2\beta H_0$. Так как собственные значения

оператора $\sigma_+ \sigma_-$ равны 1 или 0, то это состояние, в соответствии с принципом Паули, может быть занятым или пустым. Следует подчеркнуть, что обоснование такой интерпретации нерелятивистской теории спина можно получить лишь в теории вторичного квантования [1, 4, 10]. Но в данной книге предложенная нами интерпретация не приводит к каким-либо трудностям.

Поведение электрона определяется не только его спином. Необходимо учесть также его координаты и импульс. Спин коммутирует как с координатами электрона, так и с проекциями импульса, так что возможно такое представление, в котором одновременно диагональны операторы q_1, q_2, q_3 и σ_z , а базисные векторы имеют вид $|q'_1, q'_2, q'_3, \sigma'_z\rangle$, где q'_i и σ'_z — собственные значения соответствующих операторов. Значения q'_i могут быть любыми от $-\infty$ до $+\infty$, а собственные значения σ'_z равны только $+1$ или -1 . В дальнейшем мы будем интересоваться лишь спиновыми свойствами электрона — в этом случае координаты электрона можно не рассматривать.

2.8. Оператор спина в гейзенберговском представлении

Рассмотрим поведение спина электрона в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси z . Гамильтониан такой системы согласно соотношению (2.104) имеет вид

$$H = \beta H_0 \sigma_z. \quad (2.107)$$

Гейзенберговские уравнения движения (1.218) для операторов σ_z, σ_+ и σ_- принимают в этом случае вид

$$\frac{d\sigma_z(t)}{dt} = 0,$$

$$\frac{d\sigma_+(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\sigma_+(t), H] = i \frac{2\beta H_0}{\hbar} \sigma_+(t), \quad (2.108)$$

$$\frac{d\sigma_-(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\sigma_-(t), H] = -i \frac{2\beta H_0}{\hbar} \sigma_-(t).$$

Последние соотношения можно получить, используя выражение (2.107) и коммутационные соотношения (2.80с). Согласно формулам (1.216) решения уравнений (2.108)

имеют вид

$$\begin{aligned}\sigma_z(t) &= e^{i\frac{\omega'\sigma_z}{2}} \sigma_z e^{-i\frac{\omega t\sigma_z}{2}} = \sigma_z, \\ \sigma_+(t) &= e^{i\frac{\omega t\sigma_z}{2}} \sigma_+ e^{-i\frac{\omega t\sigma_z}{2}} = \sigma_+ e^{i\omega t}, \\ \sigma_-(t) &= e^{i\frac{\omega t\sigma_z}{2}} \sigma_- e^{-i\frac{\omega t\sigma_z}{2}} = \sigma_- e^{-i\omega t},\end{aligned}\quad (2.109)$$

где частота определяется разностью энергетических уровней

$$\hbar\omega = 2\beta H_0. \quad (2.110)$$

Для получения равенств (2.109) мы использовали (1.216), где положили

$$U(t, 0) = e^{-i\frac{\omega t\sigma_z}{2}}. \quad (2.111)$$

В соотношениях (2.109) операторы $\sigma_z(t)$, $\sigma_+(t)$ и $\sigma_-(t)$ даны в гейзенберговском представлении, а операторы σ_z , σ_+ и σ_- — в представлении Шредингера.

Кет-вектор произвольного состояния в момент времени t имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t\sigma_z}{2}} |\psi(0)\rangle. \quad (2.112)$$

Начальное состояние в силу соотношения полноты (2.84) можно записать в виде

$$\begin{aligned}|\psi(0)\rangle &= |+1\rangle\langle +1|\psi(0)\rangle + |-1\rangle\langle -1|\psi(0)\rangle \equiv \\ &\equiv c_1 | + 1 \rangle + c_2 | - 1 \rangle,\end{aligned}\quad (2.113)$$

где c_1 и c_2 — произвольные постоянные. Отсюда следует, что вектор состояния $|\psi(t)\rangle$ в момент времени t имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-i\frac{\omega t}{2}} | + 1 \rangle + c_2 e^{i\frac{\omega t}{2}} | - 1 \rangle. \quad (2.114)$$

По условиям нормировки $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle = 1$. Поэтому постоянные c_1 и c_2 должны удовлетворять соотношению

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (2.115)$$

В качестве упражнения читателю предлагается показать, что средние значения операторов σ_z и σ_{\pm} в состоянии $|\psi(t)\rangle$ равны

$$\begin{aligned} \langle \sigma_z \rangle &= \langle \psi(t) | \sigma_z | \psi(t) \rangle = |c_1|^2 - |c_2|^2, \\ \langle \sigma_+ \rangle &= c_1^* c_2 e^{i\omega t}, \quad \langle \sigma_x \rangle = c_1^* c_2 e^{i\omega t} + c_1 c_2^* e^{-i\omega t}, \\ \langle \sigma_- \rangle &= c_1 c_2^* e^{-i\omega t}, \quad \langle \sigma_y \rangle = -i c_1^* c_2 e^{i\omega t} + i c_1 c_2^* e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (2.116)$$

Таким образом, $\langle \sigma_x \rangle$ и $\langle \sigma_y \rangle$ прецессируют вокруг оси z с частотой ω , а $\langle \sigma_z \rangle$ остается неизменным. Такое поведение характерно и для классического магнитного момента во внешнем магнитном поле.

3. ЭЛЕКТРОНЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ

В четвертой главе мы рассмотрим квантовую теорию взаимодействия квантованного излучения с веществом. Здесь же мы дадим краткий обзор такого взаимодействия для неквантованных полей.

2.9. Гамильтониан электрона в электромагнитном поле

Рассмотрим электрон с зарядом e , массой m и спином s в магнитном поле \mathbf{H} . Пусть A является векторным потенциалом, определяемым соотношением

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad (2.117)$$

где μ_0 — проницаемость вакуума. Тогда гамильтониан такой системы имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + \beta(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}), \quad (2.118)$$

где β — магнетон Бора и \mathbf{p} — импульс электрона *). Этот гамильтониан представляет собой нерелятивистское приближение для энергии электрона в магнитном поле. Векторный потенциал и магнитное поле \mathbf{H} соответствуют той точке пространства, где в данный момент находится электрон.

*) Обобщенный канонический импульс электрона определяется соотношением $\mathbf{p} = m\mathbf{V} + e\mathbf{A}$, где m и \mathbf{V} — соответственно масса и скорость электрона.

Если магнитное поле постоянно и направлено вдоль оси z , то решение задачи о собственных значениях гамильтониана (2.118) весьма красиво и очевидно. Оно приводит к квантованному циклотронному движению электрона. Так как у нас не будет потребности в этом решении, то мы его опустим.

Если электрон находится к тому же в поле протона с зарядом $+e$, то гамильтониан примет вид

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 - \frac{e^2}{r} + \beta(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}), \quad (2.119)$$

где r — расстояние между электроном и протоном. Если $\mathbf{A} = \mathbf{H} = 0$, то этот гамильтониан описывает атом водорода в предположении, что протон бесконечно тяжел. В одной из следующих глав мы рассмотрим те видоизменения, которые необходимы для учета движения протона.

ЗАДАЧИ

2.1. Напишите матричные элементы операторов p и q для гармонического осциллятора в N -представлении.

2.2. Покажите, что энергетическая собственная функция осциллятора в координатном представлении может быть записана в виде

$$u_n(q') = \sqrt{\frac{\alpha^{2n+1}}{n! \sqrt{\pi} \alpha^n}} \left(q' - \frac{\hbar}{\omega} \frac{d}{dq'} \right)^n e^{-\frac{\alpha^2 q'^2}{2}},$$

где $\alpha = \sqrt{\omega/\hbar}$.

2.3. Пусть n и m — целые числа, а a и a^+ — операторы уничтожения и рождения бозонов. Покажите, что

$$a^m |n\rangle = \sqrt{\frac{n!}{(n-m)!}} |n-m\rangle = \frac{\sqrt{n!}}{(n-m)!} a^{+(n-m)} |0\rangle,$$

$$a^{+m} |n\rangle = \frac{a^{+(n+m)}}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!}} |n+m\rangle,$$

где $a^+ a |n\rangle = n |n\rangle$.

2.4. С помощью разложения в ряд покажите, что

$$e^{\xi a} |0\rangle = |0\rangle, \quad e^{\xi a^+} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

где ξ — некоторый параметр и $[a, a^\dagger] = 1$. Если $\langle 0 | 0 \rangle = 1$, то чему равна норма вектора $\exp(\xi a^\dagger) | 0 \rangle$?

2.5. Пусть $[a, a^\dagger] = 1$ и $a^\dagger a | n \rangle = n | n \rangle$. Покажите, что оператор $\exp(\xi a^\dagger a)$, где ξ — некоторый параметр, можно представить в виде

$$\exp(\xi a^\dagger a) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\xi n} | n \rangle \langle n |.$$

2.6. Докажите, что полный орбитальный угловой момент (2.74) удовлетворяет следующим соотношениям коммутации:

$$[L^2, l_i] = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

2.7. Найдите матричные элементы операторов σ_+ и σ_- (соотношения (2.79)) в том представлении, в котором оператор σ_x диагонален.

2.8. Выведите соотношения (2.80).

2.9. Определите средние значения операторов σ_x и σ_y в состоянии (2.114).

ОПЕРАТОРНАЯ АЛГЕБРА

3.1. Введение

В четвертой главе мы рассмотрим квантовую теорию электромагнитного поля и покажем, что поле излучения эквивалентно бесконечной совокупности гармонических осцилляторов. Поэтому неудивительно, что в теории квантованного электромагнитного поля операторы рождения и уничтожения играют центральную роль. Они удовлетворяют некоммутативной алгебре. Поэтому для нашей дальнейшей работы необходимо развить аппарат, который позволил бы более свободно пользоваться этими операторами [14, 15] *).

Необходимость более осторожного обращения с бозе-операторами рождения и уничтожения можно показать на простом примере

$$e^{\xi a + \eta a^\dagger} \neq e^{\xi a} e^{\eta a^\dagger},$$

где ξ и η — параметры. Таким образом, простейшие правила обычной алгебры неприменимы при работе с этими операторами. Мы будем в дальнейшем решать уравнения Шредингера, в которых гамильтониан выражается через бозе-операторы. Техника работы с операторами, которую мы разовьем в этой главе, позволит довольно просто решать такие задачи. В то же время решение этих задач без подобной операторной техники было бы довольно трудно или почти безнадежно. Операторная техника, которую мы разовьем, будет применена и к спиновым операторам, введенным в гл. II.

*) Автор глубоко признателен доктору Л. Р. Уолкеру из фирмы «Лаборатории Белл Телефон» за консультации по многим вопросам операторной техники, изложенным в этой главе.

В первой части мы выведем несколько теорем, которые справедливы для всех некоммутирующих операторов.

Во второй части детально изучаются бозе-операторы и вводится важное представление о нормальной форме этих операторов. С помощью этого понятия можно относительно просто решать уравнение Шредингера, уравнение для статистического оператора, вычислять матричные элементы и т. д. В разделах 3.5 и 3.6 мы подробно покажем, как можно использовать эту технику для решения уравнений Шредингера, описывающих некоторые системы. В качестве простого применения некоторых теорем о бозонах мы выведем производящую функцию для волновых функций гармонического осциллятора и обсудим развитие во времени осцилляторного волнового пакета с минимальной неопределенностью.

В третьей части мы выведем несколько теорем для операторов частиц со спином $1/2$, которые рассматривались в гл. II. В дальнейшем они окажутся полезными в гл. V, а также в гл. VII при рассмотрении простой модели лазера. Для иллюстрации различных математических методов вычислений некоторые теоремы доказываются здесь разными способами. В ряде случаев имеются другие, еще более простые доказательства, но желательно владеть несколькими методами, для того чтобы по мере надобности при решении каждой задачи выбирать наиболее удобный способ.

Мы не уточняли условий справедливости сформулированных в настоящей главе теорем. На самом деле некоторые из приведенных ниже теорем справедливы и при более общих условиях. Однако данная книга не является математической книгой, а наша цель состоит в том, чтобы научиться решать задачи, не уделяя излишне много внимания вопросам строгого обоснования.

1. ПРОИЗВОЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

3.2. Некоторые теоремы об операторах

В этом разделе мы выведем несколько полезных теорем о свойствах двух некоммутирующих операторов A и B . В дальнейшем мы будем оперировать с функциями от A или B ; при этом будем предполагать, не оговаривая этого

при формулировке каждой теоремы, что функции могут быть разложены в степенной ряд. Таким образом, любая функция от B может быть разложена в ряд вида

$$F(B) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n B^n, \quad (3.1)$$

где c_n — постоянные коэффициенты. Эти постоянные называются c -числами. Приведенное выше разложение не является наиболее общим, но оно оказывается достаточным для наших целей. На самом деле некоторые теоремы будут справедливы и для функций более общего вида, но мы опять-таки не будем касаться этого вопроса.

Кроме того, для того чтобы функция (3.1) имела смысл и в том случае, когда она применяется к собственным векторам оператора B , ряд

$$F(b) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n b^n, \quad (3.2)$$

где b — собственное значение оператора B , являющееся в общем случае комплексным числом, должен сходиться и функция $F(b)$ должна быть определена и для комплексных значений b . Если оператор B эрмитов, то тогда функция $F(b)$ может быть определена только для вещественных значений b . Во всех этих случаях не будем касаться вопросов строгого математического обоснования.

В дальнейшем мы часто будем использовать параметры, которые являются c -числами (не операторами). Мы не будем уточнять, когда эти параметры являются действительными, чисто мнимыми или комплексными. Будем предполагать, что они могут быть комплексными и что все другие связанные с ними величины вводятся соответствующим образом. Например, если ξ — комплексное число и $F(A) = \exp(\xi A)$, то мы молчаливо предполагаем, что $F(z)$ является функцией, которая определена при комплексных (z) .

Теорема 1. Пусть A и B — некоммутирующие операторы, а ξ — параметр. Тогда, если n — целое, то

$$e^{\xi A} B^n e^{-\xi A} = (e^{\xi A} B e^{-\xi A})^n \quad (3.3)$$

и

$$e^{\xi A} F(B) e^{-\xi A} = F(e^{\xi A} B e^{-\xi A}). \quad (3.4)$$

Когда $n = 1$, соотношение (3.3) превращается в тождество.

Доказательство. Для доказательства соотношений (3.3) и (3.4) отметим, что

$$e^{\xi A} e^{-\xi A} = I. \quad (3.5)$$

Теперь, используя это равенство, правую часть соотношения (3.3) можно записать в виде произведения n сомножителей:

$$e^{\xi A} B e^{-\xi A} e^{\xi A} B e^{-\xi A} \dots e^{\xi A} B e^{-\xi A},$$

что и доказывает соотношение (3.3).

Для доказательства соотношения (3.4) воспользуемся разложением (3.1) для функции $F(B)$. Тогда, учитывая доказанное соотношение (3.3), получим

$$e^{\xi A} F(B) e^{-\xi A} = \sum_n c_n e^{\xi A} B^n e^{-\xi A} = \sum_n c_n (e^{\xi A} B e^{-\xi A})^n.$$

Если теперь в соотношение (3.1) подставить в качестве аргумента величину $e^{\xi A} B e^{-\xi A}$ и сравнить полученную формулу с написанной выше последней суммой, то мы получим доказательство соотношения (3.4).

Рассмотрим применение этой теоремы для случая, когда $A = ip/\hbar$, $B = F(q)$, где $[q, p] = i\hbar$. Тогда в силу соотношения (3.4) имеем

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{i\xi p}{\hbar}\right) F(q) \exp\left(-\frac{i\xi p}{\hbar}\right) &= \\ &= F\left(\exp\left(\frac{i\xi p}{\hbar}\right) q \exp\left(-\frac{i\xi p}{\hbar}\right)\right). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Если ξ — действительное число, то тогда из формул (1.122), (1.123) и (1.126) следует, что

$$\exp\left(\frac{i\xi p}{\hbar}\right) q \exp\left(-\frac{i\xi p}{\hbar}\right) = q + \xi. \quad (3.7)$$

Поэтому выражение (3.6) превращается в следующее:

$$f(\xi, p, q) = \exp\left(\frac{i\xi p}{\hbar}\right) F(q) \exp\left(-\frac{i\xi p}{\hbar}\right) = F(q + \xi). \quad (3.8)$$

Существует другое интересное доказательство соотношения (3.8). Если мы возьмем частную производную по ξ от выражения для функции $f(\xi, p, q)$ в равенстве (3.8) и воспользуемся соотношением (1.120), то получим

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = \frac{i}{\hbar} [p, f] = \frac{\partial f}{\partial q}. \quad (3.9)$$

Последнее равенство представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных относительно функции f .

Очевидно, что любая функция, которая имеет вид

$$f(\xi, p, q) = g(q + \xi), \quad (3.10)$$

является решением уравнения (3.9). Для того чтобы найти вид функции g , мы положим $\xi = 0$ в формулах (3.8) и (3.10). Тогда получим

$$f(0, p, q) = F(q) = g(q).$$

Отсюда сразу следует соотношение (3.8). Мы будем часто пользоваться этой техникой для доказательства следующих теорем этой главы.

Т е о р е м а 2. Если A и B — два некоммутирующих оператора и существует оператор A^{-1} , то тогда

$$AB^n A^{-1} = (ABA^{-1})^n, \quad (3.11)$$

где n — целое число, и

$$AF(B)A^{-1} = F(ABA^{-1}). \quad (3.12)$$

Доказательство. Эта теорема доказывается так же, как теорема 1. В теореме 1 операторы $\exp(\pm \xi A)$ всегда существуют, в то время как в теореме 2 можно использовать только такие операторы A , для которых существуют обратные операторы A^{-1} . В частном случае, когда $F(B) = \exp(B)$, соотношение (3.12) принимает вид

$$Ae^{BA^{-1}} = \exp(ABA^{-1}). \quad (3.13)$$

Т е о р е м а 3. Если A и B — два заданных некоммутирующих оператора и ξ — параметр, то тогда

$$e^{\xi A} B e^{-\xi A} = B + \xi [A, B] + \frac{1}{2!} \xi^2 [A, [A, B]] + \\ + \frac{1}{3!} \xi^3 [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (3.14)$$

Доказательство. Положим

$$f(\xi) = e^{\xi A} B e^{-\xi A}, \quad f(0) = B$$

и разложим функцию $f(\xi)$ в ряд Маклорена по степеням параметра ξ . Рассмотрим производные функции $f(\xi)$:

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\xi} &= [A, f(\xi)], & \frac{df}{d\xi} \Big|_{\xi=0} &= [A, B], \\ \frac{d^2f}{d\xi^2} &= \left[A, \frac{df}{d\xi} \right] = [A, [A, f(\xi)]], & \frac{d^2f}{d\xi^2} \Big|_{\xi=0} &= [A [A, B]]. \end{aligned}$$

Продолжая этот процесс, получаем формулу (3.14).

Применим эту теорему для случая, когда $A = ip/\hbar$, $B = q$, и допустим, что ξ — действительное число. Тогда, если $[p, q] = -i\hbar$, то из соотношения (3.14) мы получим

$$\exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right) q \exp\left(-\frac{ip\xi}{\hbar}\right) = q + \xi \left[\frac{ip}{\hbar}, q \right] = q + \xi, \quad (3.15)$$

ибо все остальные коммутаторы в соотношении (3.14) обращаются в нуль. Это и есть как раз формула (3.6), которая была выведена ранее другим способом.

Рассмотрим еще одно применение этой теоремы. Положим $A = q^2/2$ и $B = d/dq$, где q — переменная. Легко показать, что

$$[A, B] = \frac{1}{2} \left[q^2, \frac{d}{dq} \right] = -q \quad (3.16)$$

(при этом мы молчаливо предполагаем, что обе части равенства (3.16) действуют на некоторую функцию $F(q)$). Кроме того,

$$[A, [A, B]] = \frac{1}{2} [q^2, -q] = 0,$$

и поэтому ряд (3.14) обрывается на втором члене и приобретает вид

$$e^{1/2\xi q^2} \frac{d}{dq} e^{-1/2\xi q^2} = \left(\frac{d}{dq} - \xi q \right). \quad (3.17)$$

Здесь снова молчаливо предполагается, что мы применяем левую и правую части этого операторного равенства к некоторой функции от q , например к функции $F(q)$.

Из равенства (3.17) и теоремы 2 (формула (3.11)) мы также находим, что

$$e^{1/2\xi q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-1/2\xi q^2} = \left(\frac{d}{dq} - \xi q \right)^n, \quad (3.18)$$

где n — целое число.

Т е о р е м а 4. Если A и B — два некоммутирующих оператора, которые удовлетворяют условиям

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0, \quad (3.19)$$

то тогда

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-1/2[A, B]} = e^B e^A e^{+1/2[A, B]}. \quad (3.20)$$

Эта теорема является частным случаем теоремы Бекера — Хаусдорфа из теории групп. Для читателя, интересующегося более тонкими вопросами операторного формализма, могут быть интересны работы [16—19]. Приведенное здесь доказательство этой теоремы было предложено Глаубером (см. [2], т. 1).

Любые два оператора, коммутатор которых есть c -число, например $[q, p] = i\hbar$ и $[a, a^+] = 1$, удовлетворяют условиям теоремы. Поэтому неудивительно, что эта теорема имеет много применений.

Доказательство. Для того чтобы доказать эту теорему, рассмотрим операторную функцию

$$f(\xi) = e^{\xi A} e^{\xi B}, \quad (3.21)$$

где c -число ξ является параметром. Если мы продифференцируем функцию (3.21) по ξ , то получим

$$\frac{df}{d\xi} = A e^{\xi A} e^{\xi B} + e^{\xi A} A e^{\xi B} = (A + e^{\xi A} B e^{-\xi A}) f(\xi), \quad (3.22)$$

ибо $\exp(\xi A) \exp(-\xi A) = I$. Для того чтобы упростить второй член в круглых скобках, мы можем использовать теорему 3 (формулу (3.14)). В силу равенства (3.19) все члены в выражении (3.14), кроме первых двух, обращаются в нуль. Тогда мы получаем

$$e^{\xi A} B e^{-\xi A} = B + \xi [A, B]. \quad (3.23)$$

В результате уравнение (3.22) может быть записано в виде

$$\frac{df}{d\xi} = \{(A + B) + \xi [A, B]\} f(\xi). \quad (3.24)$$

Из соотношения (3.19) следует, что величина $A + B$ коммутирует с $[A, B]$, и поэтому можно рассматривать эти две величины как обычные коммутирующие переменные и интегрировать уравнение (3.24) при начальном условии (см. (3.21))

$$f(0) = 1. \quad (3.25)$$

Решение уравнения (3.24), удовлетворяющее условию (3.25), имеет вид

$$f(\xi) = e^{(A+B)\xi + 1/2 \xi^2 [A, B]} = e^{(A+B)\xi} e^{1/2 \xi^2 [A, B]}. \quad (3.26)$$

Последнее равенство в (3.26) следует из того, что $A + B$ коммутирует с $[A, B]$. Если мы теперь приравняем (3.24) и (3.26), положив $\xi = 1$, и умножим обе части полученного равенства справа на $\exp(-1/2 [A, B])$, то придем к формуле (3.20). Доказательство второго равенства в (3.20) предоставляем читателю в качестве упражнения.

Применим формулу (3.20) в частном случае, когда $A = \lambda p$, $B = \mu q$, где $[q, p] = i\hbar$ и λ, μ — параметры. Тогда согласно (3.20) получим

$$e^{\lambda p + \mu q} = e^{\lambda p} e^{\mu q} \exp\left(\frac{i\hbar \lambda \mu}{2}\right). \quad (3.27)$$

2. БОЗЕ-ОПЕРАТОРЫ РОЖДЕНИЯ И УНИЧТОЖЕНИЯ

В шестой и седьмой главах мы встретимся с решением квантовых задач, в которых используются операторы рождения и уничтожения бозонов. Это, например, задача о расчете средних значений операторов, которые являются функциями от a и a^+ . Знание таких средних значений операторов позволяет проводить сравнение теории и эксперимента. Кроме того, в дальнейшем возникнет необходимость решать уравнения Шредингера, содержащие бозе-операторы.

Одним из примеров является осциллятор, находящийся под действием внешней вынуждающей силы, гамильтониан которого имеет вид

$$H = \hbar\omega (a^+ a + 1/2) + \hbar f(t) (a + a^+). \quad (3.28)$$

Здесь функция $f(t)$ определяется внешней вынуждающей

силой. Так как гамильтониан зависит от времени, то описываемая этим гамильтонианом система неконсервативна. В данный момент единственный метод, который имеется в нашем распоряжении для решения даже такой простой задачи,— это решение с помощью громоздкой итерационной формулы (1.211). Наша цель заключается в том, чтобы развить для решения таких задач гораздо более сильную операторную технику. Эта техника основана на понятиях о нормальном упорядочении операторов и о нормальной форме функции от операторов. Эти понятия мы введем в следующем разделе. Далее мы докажем ряд важных теорем о бозе-операторах. Эти теоремы окажутся очень полезными в шестой и седьмой главах.

3.3. Нормальное произведение, оператор нормального упорядочения и нормальная форма

Бозе-операторы a и a^+ удовлетворяют соотношению коммутации

$$[a, a^+] = 1. \quad (3.29)$$

Нас снова интересуют такие функции от операторов a и a^+ , которые можно записать в нескольких эквивалентных формах, используя (3.29). Например, функция

$$f_1(a, a^+) = aa^+ \quad (3.30a)$$

и функция

$$f_2(a, a^+) = a^+a + 1 \quad (3.30b)$$

равны между собой в силу соотношения (3.29), но они имеют разные формы. Поэтому две функции могут быть равны как операторные, но не тождественно равны по форме.

В любом выражении, содержащем произведение операторов рождения и уничтожения, подобном, например, выражениям f_1 или f_2 , произведение называется нормальным, если все операторы уничтожения находятся справа от всех операторов рождения. Так, произведение $f_1 = aa^+$ не является нормальным произведением, в то время как произведение $f_2 = 1 + a^+a$ является нормальным произведением. Вообще по определению, если l и m — целые числа, то произведение $a^{+l}a^m$ является нормальным произведени-

ем, а произведение $a^m a^{+l}$ не является нормальным произведением.

Определим далее оператор нормального упорядочения N^*), который применяется к любой функции $f(a, a^+)$, следующим образом.

Предположим, что a и a^+ — обычные коммутирующие переменные (c -числа). Отметим этот факт черточкой над величинами a и a^+ . В результате величины \bar{a} и \bar{a}^+ становятся двумя различными c -числами и коммутируют друг с другом. Выберем функцию $f(\bar{a}, \bar{a}^+)$ в форме произвольного степенного ряда от двух переменных, в котором коэффициенты разложения являются c -числами. Определим оператор нормального упорядочения с помощью следующих соотношений:

$$N \{\bar{a}^m \bar{a}^{+l}\} = a^{+l} a^m, \quad (3.31a)$$

$$N \{c f(\bar{a}, \bar{a}^+)\} = c N \{f(\bar{a}, \bar{a}^+)\}, \quad (3.31b)$$

$$N \{f_1(\bar{a}, \bar{a}^+) + f_2(\bar{a}, \bar{a}^+)\} = N \{f_1(\bar{a}, \bar{a}^+)\} + N \{f_2(\bar{a}, \bar{a}^+)\}, \quad (3.31c)$$

$$N \{c\} = c I, \quad (3.31d)$$

где l и m — целые числа, c — произвольное комплексное число, а I — единичный тождественный оператор.

Из определения оператора N следует, что в скобках после символа N все операторы рассматриваются как c -числа. В каждом члене разложения в степенной ряд все операторы рождения перемещаются налево, а все операторы уничтожения — направо; в результате получается некоторый новый оператор. (Ясно, что можно определить и обратный оператор N^{-1} .)

Для того чтобы понять, как выглядит действие оператора N на практике, применим этот оператор к нескольким функциям от a и a^+ .

Пример 1. Положим

$$f(a, a^+) = a.$$

*) Оператор нормального упорядочения не надо путать с оператором числа частиц, введенным в гл. II. Употребление этих операторов ясно из контекста.

Тогда из (3.31a) следует, что

$$N \{f(\bar{a}, \bar{a}^+)\} = N \{\bar{a}\} = a \equiv f(a, a^+).$$

В этом случае $N \{f\}$ тождественно равно f ; при этом $N \{f\}$ имеет ту же самую функциональную форму, что и f .

Пример 2. Положим

$$f_1(a, a^+) = aa^+, \quad f_2(a, a^+) = a^+a.$$

В этом случае из (3.31a) следует, что

$$N \{f_1(\bar{a}, \bar{a}^+)\} = N \{\bar{a}\bar{a}^+\} = a^+a \neq f_1(a, a^+),$$

$$N \{f_2(\bar{a}, \bar{a}^+)\} = N \{\bar{a}^+\bar{a}\} = a^+a \equiv f_2(a, a^+).$$

Мы видим, что хотя $f_1 \neq f_2$, но $N \{f_1\} = N \{f_2\} \equiv f_2$. Снова используем символ тождества для того, чтобы отметить то обстоятельство, что две величины не только равны как операторы, но и имеют одинаковую форму.

Пример 3. Положим

$$f_1 = aa^+, \quad f_2 = a^+a + 1.$$

Из соотношения коммутации следует:

$$f_1 = f_2,$$

но функции f_1 и f_2 не тождественно равны, так как их функциональные формы различны. Если мы применим оператор N к функциям f_1 и f_2 и используем соотношения (3.31a) и (3.31d), то найдем, что

$$N \{f_1\} = N \{\bar{a}\bar{a}^+\} = a^+a \neq f_1,$$

$$N \{f_2\} = N \{\bar{a}^+\bar{a} + 1\} = a^+a + 1 \equiv f_2.$$

В этом случае

$$N \{f_1\} \neq N \{f_2\} \equiv f_2,$$

хотя $f_1 = f_2$.

Пример 4. Положим

$$f_1 = aa^+a, \quad f_2 = a^2a^+ - a, \quad f_3 = a^+a^2 + a.$$

Используя условие (3.29), можно легко показать, что $f_1 = f_2 = f_3$, но никакая пара этих величин не имеет

одинаковой функциональной формы. Далее получаем

$$N \{f_1\} = N \{\bar{a}\bar{a}^+\bar{a}\} = a^+a^2 \neq f_1,$$

$$N \{f_2\} = N \{\bar{a}^2\bar{a}^+ - \bar{a}\} = a^+a^2 - a \neq f_2,$$

$$N \{f_3\} = N \{\bar{a}^+\bar{a}^2 + \bar{a}\} = a^+a^2 + a \equiv f_3.$$

Как видим, опять $N \{f_1\} \neq N \{f_2\} \neq N \{f_3\} \equiv f_3$, хотя $f_1 = f_2 = f_3$.

Пример 5. Положим

$$f_1 = aa^+a, f_2 = a^2a^+, f_3 = a^+a^2.$$

В этом случае $f_1 \neq f_2 \neq f_3$, но

$$N \{f_1\} = N \{f_2\} = N \{f_3\} \equiv f_3.$$

Пример 6. Если x — параметр, то

$$N \{\exp(x\bar{a}^+\bar{a})\} = N \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x\bar{a}^+\bar{a})^n}{n!} \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n a^+ a^n}{n!}.$$

Из этих примеров видно, как оператор N применяется на практике.

Рассмотрим теперь некоторую функцию $f(a, a^+)$. Если для этой функции

$$N \{f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+)\} \equiv f^{(n)}(a, a^+), \quad (3.32)$$

то по определению эта функция задана в нормальной форме и она обозначается в этом случае как $f^{(n)}(a, a^+)$. Таким образом, если после применения оператора N форма функции остается неизменной, то функция задана в нормальной форме. Индекс (n) означает, что функция $f^{(n)}(a, a^+)$ представляет собой сумму членов, каждый из которых является нормальным произведением операторов a и a^+ .

Рассмотрим снова предыдущие примеры. В примере 1 функция $f = a$ задана в нормальной форме, так как $N \{f\} \equiv f$. Поэтому можно записать, что $f^{(n)} = a$. В примере 2 $N \{f_2\} \equiv f_2$, и поэтому $f_2^{(n)} = a^+a$. В примере 3 $f_2^{(n)} = a^+a + 1 = f_1$. Таким образом, можно использовать один и тот же символ $f_1 = f_2 = f$ и записать

$$f = aa^+ = f^{(n)} \equiv a^+a + 1.$$

Но функции f и $f^{(n)}$ имеют различные функциональные формы. В примере 4 $f = f_1 = f_2 = f_3 \equiv f^{(n)}$. Но только функция f_3 тождественна $f^{(n)}$ и поэтому представлена в нормальной форме; функции f_1 и f_2 не представлены в нормальной форме, хотя они равны нормальной форме. В примере 5 имеем $f_3^{(n)} \equiv a^+ a^2 \equiv f_3$. Пример 6 мы обсудим в лемме, которая следует за теоремой 10.

Мы условились, что функция задана в нормальной форме в том случае, когда применение оператора N не изменяет ее. К сожалению, когда функция не задана заранее в нормальной форме, это определение не помогает преобразовать ее к нормальной форме. Большая часть следующего раздела будет посвящена методам преобразования функции $f(a, a^+)$ к нормальной форме. Очевидно, что нормальная форма $f^{(n)}$ равна f , т. е.

$$f(a, a^+) = f^{(n)}(a, a^+) \equiv N \{f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+)\},$$

но в общем случае функциональные формы f и $f^{(n)}$ различны.

Проиллюстрируем процесс приведения функции к нормальной форме методами, которые имеются сейчас в нашем распоряжении.

Пример 7. Положим $f = a a^+$. Из соотношения (3.29) видно, что

$$f = a a^+ = a^+ a + 1 \equiv f^{(n)}.$$

Таким образом, функция f приведена к нормальной форме. Нормальная форма, конечно, отличается от функции, которая получается при применении оператора N к f . Действительно,

$$N \{f\} \neq f^{(n)}.$$

Пример 8. Положим $f = a a^{+2} a$. Чтобы привести это выражение к нормальной форме, нужно переместить оператор a^{+2} налево, используя условие (3.29). В результате получаем

$$\begin{aligned} f = a a^{+2} a &= (a^+ a + 1) a^+ a = a^+ a a^+ a + a^+ a = \\ &= a^+ (1 + a^+ a) a + a^+ a = 2 a^+ a + a^{+2} a^2 \equiv f^{(n)}. \end{aligned}$$

Таким образом, выражение f преобразовано к нормальной форме.

К сожалению, этот процесс практически невозможен для сложных функций.

Рассмотрим встречающийся на практике пример, когда применение этого метода совершенно безнадежно.

Пример 9. Положим

$$f(a, a^+) = e^{\alpha a^+ a} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^m (a^+ a)^m}{m!}.$$

Это степенное разложение функции $\exp(\alpha a^+ a)$. Таким образом, возникает проблема приведения к нормальной форме члена

$$(a^+ a)^m = (a^+ a \cdot a^+ a \cdot a^+ a \dots a^+ a)$$

с помощью соотношения (3.29). Это в лучшем случае очень утомительный процесс. Поэтому в дальнейшем для решения этой задачи мы разработаем некоторые косвенные методы. С другой стороны, как было показано выше, вычисление $N\{\exp \alpha \bar{a}^+ \bar{a}\}$ является тривиальной задачей.

3.4. Алгебраические свойства бозе-операторов

Расчет средних значений любых функций от операторов a и a^+ значительно упрощается, если эти функции предварительно представлены в нормальной форме. В этом разделе мы выведем несколько теорем, которые упрощают приведение функций к нормальной форме.

Теорема 5. Если l — целое число, то тогда

$$[a, a^{+l}] = l a^{+(l-1)} = \frac{\partial a^{+l}}{\partial a^+}, \quad [a^+, a^l] = -l a^{l-1} = -\frac{\partial a^l}{\partial a}. \quad (3.33)$$

Эти формулы аналогичны формулам (1.118). Их можно вывести методом математической индукции из соотношения (3.29). Доказательство предоставляем читателю.

Определим более точно, как понимать символы $\partial/\partial a$ и $\partial/\partial a^+$, когда величины a и a^+ являются операторами. Не будет ошибкой, если мы определим дифференцирование как формальный процесс, который задан формулами (3.33). Чтобы быть более точными, мы можем заменить операторы a или a^+ операторами $a + x$ или $a^+ + x$, где x есть c -число,

и записать

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial x} (a^+ + x)^l &= \\ &= \lim_{x \rightarrow 0} l (a^+ + x)^{l-1} = l a^{+(l-1)} = \frac{\partial a^{+l}}{\partial a^+}, \end{aligned} \quad (3.34a)$$

и аналогично

$$\frac{\partial a^l}{\partial a} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial x} (a + x)^l. \quad (3.34b)$$

Т е о р е м а 6. Пусть x есть c -число и $f(a, a^+)$ — функция, которая может быть разложена в степенной ряд по a и a^+ . Тогда

$$e^{xa} f(a, a^+) e^{-xa} = f(a, a^+ + x), \quad (3.35a)$$

$$e^{-xa^+} f(a, a^+) e^{xa^+} = f(a + x, a^+). \quad (3.35b)$$

Доказательство. Для того чтобы доказать эту теорему, воспользуемся равенством $\exp(xa) \exp(-xa) = 1$ и тем, что f можно разложить в степенной ряд. Тогда получаем для (3.35a)

$$e^{xa} f(a, a^+) e^{-xa} = f(e^{xa} a e^{-xa}, \quad e^{xa} a^+ e^{-xa}) = f(a, e^{xa} a^+ e^{-xa}). \quad (3.36)$$

Эта формула доказывается таким же методом, каким была доказана теорема 1. С помощью теоремы 3 и соотношений (3.14) и (3.29) можно убедиться в том, что

$$e^{xa} a^+ e^{-xa} = a^+ + x [a, a^+] = a^+ + x. \quad (3.37)$$

Все остальные коммутаторы обращаются в нуль. Из формул (3.36) и (3.37) следует уравнение (3.35a). Аналогичным образом доказывается формула (3.35b). Отметим, что эта теорема справедлива также и в том случае, когда функция f представлена в нормальной форме; при этом функции $e^{xa} f^{(n)}(a, a^+)$ и $f^{(n)}(a, a^+) e^{xa^+}$ не будут в нормальной форме. Однако из (3.35) получаем

$$\begin{aligned} e^{xa} f^{(n)}(a, a^+) &= f^{(n)}(a, a^+ + x) e^{xa}, \\ f^{(n)}(a, a^+) e^{xa^+} &= e^{xa^+} f^{(n)}(a + x, a^+). \end{aligned} \quad (3.38a)$$

Правые части этих уравнений представлены в нормальной форме, и, следовательно, с помощью формул (3.22) их можно записать в виде

$$\begin{aligned} e^{xa} f^{(n)}(a, a^+) &= N \{ \exp(x\bar{a}) f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+ + x) \}, \\ f^{(n)}(a, a^+) e^{xa^+} &= N \{ \exp(x\bar{a}^+) f^{(n)}(\bar{a} + x, \bar{a}^+) \}. \end{aligned} \quad (3.38b)$$

Этот результат показывает, как представить выражения типа $e^{xa} f^{(n)}$ и $f^{(n)} e^{xa^+}$ в нормальной форме.

Т е о р е м а 7. Пусть $f(a, a^+)$ — функция от a и a^+ , которая может быть разложена в степенной ряд по a и a^+ . Тогда

$$[a, f(a, a^+)] = \frac{\partial f}{\partial a^+}, \quad (3.39a)$$

$$[a^+, f(a, a^+)] = -\frac{\partial f}{\partial a}. \quad (3.39b)$$

Доказательство. Приведем простое доказательство формулы (3.39a). Рассмотрим функцию

$$F(x) = e^{xa} f(a, a^+) e^{-xa} = f(a, a^+ + x). \quad (3.40)$$

Очевидно, что

$$F(0) = f(a, a^+), \quad (3.41)$$

и с помощью (3.40) получаем

$$\frac{\partial F}{\partial x} = [a, F(x)] = \frac{\partial}{\partial x} f(a, a^+ + x).$$

Если теперь перейти к пределу при $x \rightarrow 0$ в обеих частях этого равенства и воспользоваться формулой (3.41), то получим

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial f(a, a^+ + x)}{\partial x} = [a, f(a, a^+)] = \frac{\partial f}{\partial a^+}, \quad (3.42)$$

ибо в силу равенства (3.34a) левая часть равенства (3.42) как раз и является частной производной от функции $f(a, a^+)$ по оператору a^+ . Аналогично доказывается формула (3.39b). Нужно подчеркнуть, что, когда используются формулы (3.39), всегда должен строго сохраняться порядок сомножителей в функции f . Применим формулу (3.39a) к функции $f = a^+ a a^{+2}$. Тогда получим, что

$$[a, a^+ a a^{+2}] = \frac{\partial}{\partial a^+} (a^+ a a^{+2}) = 2a^+ a a^+ + a a^{+2}.$$

Дадим теперь другое доказательство формулы (3.39а). Предположим, что каким-то образом функция f приведена к нормальной форме. Тогда $f = f^{(n)}$ (это не тождество) и разложение $f^{(n)}$ в степенной ряд имеет вид

$$f(a, a^+) = f^{(n)}(a, a^+) \equiv \sum_l \sum_m f_{lm} a^+{}^l a^m, \quad (3.43)$$

где коэффициенты разложения f_{lm} суть s -числа. Затем получаем

$$[a, f^{(n)}(a, a^+)] = \sum_l \sum_m f_{lm} [a, a^+{}^l a^m].$$

Если мы используем результат задачи 1.8, f) и теорему 5 (уравнения (3.33)), то получим

$$[a, f^{(n)}(a, a^+)] = \sum_{l,m} f_{lm} [a, a^+{}^l] a^m = \sum_{l,m} f_{lm} l a^+{}^{(l-1)} a^m.$$

Сравнивая этот результат с формулой (3.43), мы видим, что

$$[a, f^{(n)}(a, a^+)] = \frac{\partial f^{(n)}}{\partial a^+}.$$

Так как $f = f^{(n)}$, то отсюда следует формула (3.39а). Если же функция f не представлена в нормальной форме, то можно получить сколько угодно эквивалентных разложений функции f в степенной ряд и доказательство становится гораздо более трудным. Эта теорема справедлива независимо от того, представлена ли функция f в нормальной форме или нет. Важно только помнить, что при применении теоремы необходимо сохранять порядок сомножителей.

Мы можем использовать эту теорему при приведении к нормальной форме выражений $af^{(n)}$ и $f^{(n)}a^+$. Если функция $f^{(n)}$ записана в нормальной форме, то ясно, что $af^{(n)}$ и $f^{(n)}a^+$ не приведены к нормальной форме. Однако, используя (3.39), мы получаем выражения

$$af^{(n)} = f^{(n)}a + \frac{\partial f^{(n)}}{\partial a^+}, \quad f^{(n)}a^+ = a^+f^{(n)} + \frac{\partial f^{(n)}}{\partial a}, \quad (3.44а)$$

правые части которых представляют собой нормальные формы. Поэтому с помощью (3.32) мы можем записать

эти выражения в виде

$$\begin{aligned} af^{(n)} &= N \left\{ \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right) f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+) \right\}, \\ f^{(n)} a^+ &= N \left\{ \left(\bar{a}^+ + \frac{\partial}{\partial \bar{a}} \right) f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+) \right\}. \end{aligned} \quad (3.44b)$$

Таким образом, дан простой метод приведения выражений вида $af^{(n)}$ и $f^{(n)} a^+$ к нормальной форме. Снова отметим, что под знаком оператора N величины a и a^+ становятся s -числами. Поскольку правая часть равенства (3.44а) уже была приведена к нормальной форме, то применение к ней оператора N в соответствии с (3.32) оставляет ее неизменной.

Т е о р е м а 8. Если функция $f^n(a, a^+)$ представлена в нормальной форме, то

$$\begin{aligned} a^m f^{(n)}(a, a^+) &= N \left\{ \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right)^m f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+) \right\}, \\ f^{(n)}(a, a^+) a^{+m} &= N \left\{ \left(\bar{a}^+ + \frac{\partial}{\partial \bar{a}} \right)^m f^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+) \right\}, \end{aligned} \quad (3.45)$$

где m — целое число.

С помощью этой теоремы можно представлять в нормальной форме выражения вида $a^m f^{(n)}$ и $f^{(n)} a^{+m}$. Ее легко можно доказать с помощью метода математической индукции. Это мы предоставляем сделать читателю.

Т е о р е м а 9. Если $f(a, a^+)$ можно разложить в степенной ряд по a и a^+ , то тогда

$$e^{xa^+a} f(a, a^+) e^{-xa^+a} = f(ae^{-x}, a^+e^x). \quad (3.46)$$

В частности,

$$e^{xa^+a} a e^{-xa^+a} = a e^{-x}, \quad (3.47a)$$

$$e^{xa^+a} a^+ e^{-xa^+a} = a^+ e^x. \quad (3.47b)$$

Доказательство. Формулы (3.47) можно доказать с помощью соотношения (3.14). Однако мы используем ниже более простой метод. Обозначим

$$F(x) = e^{xa^+a} a e^{-xa^+a}, \quad F(0) = a.$$

Тогда

$$\frac{dF}{dx} = e^{xa^{\dagger}a} [a^{\dagger}a, a] e^{-xa^{\dagger}a} = -e^{xa^{\dagger}a} a e^{-xa^{\dagger}a} = -F(x),$$

где использовано соотношение $[a^{\dagger}a, a] = -a$. Решение этого уравнения имеет вид

$$F(x) = F(0) e^{-x} = a e^{-x},$$

и соотношение (3.47а) доказано. Аналогично доказывается формула (3.47б). Здесь функция $F(x)$, по существу, оператор $a(x)$ в гейзенберговском представлении, если в гамильтониане $H = \hbar\omega (a^{\dagger}a + 1/2)$ положить $x = i\omega t$.

Для доказательства равенства (3.46) левую его часть представим в виде

$$e^{xa^{\dagger}a} f(a, a^{\dagger}) e^{-xa^{\dagger}a} = f(e^{xa^{\dagger}a} a e^{-xa^{\dagger}a}, e^{xa^{\dagger}a} a^{\dagger} e^{-xa^{\dagger}a})$$

и воспользуемся соотношениями (3.47).

Хотя формула (3.46) справедлива в том случае, когда функция $f^{(n)}$ задана в нормальной форме, эта формула не дает никакого метода приведения выражений $e^{xa^{\dagger}a} f^{(n)}$ и $f^{(n)} e^{xa^{\dagger}a}$ к нормальной форме. Мы предлагаем читателю выяснить причины этого.

Лемма. Если $|0\rangle$ — состояние вакуума, так что $a|0\rangle = 0$, и x и y — параметры, то тогда

$$e^{xa^{\dagger}a} e^{ya^{\dagger}} |0\rangle = \exp(ye^x a^{\dagger}) |0\rangle. \quad (3.48)$$

Доказательство 1. С помощью (3.46) получаем

$$e^{xa^{\dagger}a} e^{ya^{\dagger}} = \exp(ye^x a^{\dagger}) e^{xa^{\dagger}a}. \quad (3.49)$$

Пусть $f(a^{\dagger}a)$ — любая функция от $a^{\dagger}a$. Тогда

$$f(a^{\dagger}a) |n\rangle = f(n) |n\rangle, \quad (3.50)$$

ибо $a^{\dagger}a |n\rangle = n |n\rangle$. Отсюда следует, что

$$e^{xa^{\dagger}a} |0\rangle = |0\rangle, \quad (3.51)$$

и мы получим формулу (3.48), если применим обе стороны операторного равенства (3.49) к состоянию вакуума $|0\rangle$.

Следующий метод доказательства этой леммы называется экспоненциальным методом. Он оказывается очень полезным при решении задач операторной алгебры. Этот метод основан на некотором предположении, правильность которого легко проверяется после того, как получено решение задачи. В сущности, этот метод состоит в угадывании того, какую форму имеет ответ в задачах типа (3.48). Таким же образом с помощью простых пробных функций решаются дифференциальные уравнения.

Доказательство 2. Предположим, что левая часть (3.48) может быть записана в форме

$$e^{xa^+} e^{ya^+} |0\rangle = e^{G(x, y, a^+)} |0\rangle, \quad (3.52)$$

где G — простой степенной ряд по a^+ ,

$$G(x, y, a^+) = A(x, y) + B(x, y)a^+ + C(x, y)a^{+2} + \dots \quad (3.53)$$

и A, B, C, \dots суть c -числа, которые подлежат определению. Если мы положим $x = 0$, то из равенств (3.52) и (3.53) следует, что G должно удовлетворять тождеству

$$G(0, y, a^+) = ya^+ \equiv A(0, y) + B(0, y)a^+ + C(0, y)a^{+2} + \dots, \quad (3.54)$$

из которого вытекает, что

$$A(0, y) = 0 = C(0, y) = D(0, y) = \dots, \quad B(0, y) = y. \quad (3.55)$$

Из принятой выше формы для функции G ясно, что

$$\left[G, \frac{\partial G}{\partial x} \right] = 0. \quad (3.56)$$

Поэтому, если мы продифференцируем обе части (3.52) по x и умножим слева на e^{-G} , то получим

$$e^{-G} a^+ a e^G |0\rangle = \frac{\partial G}{\partial x} |0\rangle. \quad (3.57)$$

Так как функция G по предположению является функцией только от a^+ , то $\exp(-G)$ коммутирует с a^+ . Тогда равенство (3.57) сводится к

$$a^+ e^{-G} a e^G |0\rangle = \frac{\partial G}{\partial x} |0\rangle. \quad (3.58)$$

С помощью теоремы 3 (см. (3.14)) получаем

$$e^{-G} a e^G |0\rangle = \{a + [a, G] + [[a, G], G] + \dots\} |0\rangle. \quad (3.59)$$

Первый член в выражении (3.59) исчезает, так как $a |0\rangle = 0$. Далее, из формулы (3.39а) теоремы 7 следует, что $[a, G] = \partial G / \partial a^+$, и, следовательно, этот коммутатор является функцией только от a^+ . Поэтому все коммутаторы высших порядков в выражении (3.59) равны нулю. Отсюда следует, что

$$e^{-G} a e^G |0\rangle = \left(a + \frac{\partial G}{\partial a^+} \right) |0\rangle = \frac{\partial G}{\partial a^+} |0\rangle, \quad (3.60)$$

и равенство (3.58) приобретает вид

$$a^+ e^{-G} a e^G |0\rangle = a^+ \frac{\partial G}{\partial a^+} |0\rangle \equiv \frac{\partial G}{\partial x} |0\rangle. \quad (3.61)$$

Используя соотношение (3.53), приводим выражение (3.61) к виду

$$a^+ (B + 2Ca^+ + \dots) |0\rangle \equiv \left(\frac{\partial A}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial x} a^+ + \frac{\partial C}{\partial x} a^{+2} + \dots \right) |0\rangle. \quad (3.62)$$

Приравняв в обеих частях равенства (3.62) коэффициенты при одинаковых степенях a^+ и воспользовавшись соотношением (3.55), получим

$$\frac{\partial A}{\partial x} = 0 \rightarrow A(x, y) = 0,$$

$$\frac{\partial B}{\partial x} = B \rightarrow B(x, y) = ye^x,$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 2C \rightarrow C = 0 = D = \dots$$

Отсюда следует, что $G(x, y, a^+) = ye^x a^+$, и лемма доказана. Таким образом, показано, что форма решения выбрана правильно.

Доказательство 3. Кроме приведенных выше двух доказательств существует еще другое, более простое доказательство леммы с помощью разложения в степенной ряд.

Воспользовавшись соотношением (2.40), можно записать

$$e^{xa+a} e^{ya^+} |0\rangle =$$

$$= e^{xa+a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n a^{+n}}{n!} |0\rangle = e^{xa+a} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{y^m}{\sqrt{m!}} |m\rangle. \quad (3.63)$$

Далее, с помощью равенства (3.50) получаем

$$e^{xa+a} e^{ya^+} |0\rangle =$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{y^m e^{mx}}{\sqrt{m!}} |m\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} (e^x y)^m \frac{a^{+m}}{m!} |0\rangle = \exp(e^x y a^+) |0\rangle.$$

Здесь снова было использовано соотношение (2.40), а последнее равенство получено путем суммирования ряда.

Т е о р е м а 10. Если f — любая функция оператора a^+a , то ее нормальная форма имеет вид

$$f^{(n)}(a^+a) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{\Delta^r f(0)}{r!} a^+ r a^r \equiv \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{s=0}^r \frac{(-1)^s f(r-s)}{(r-s)! s!} a^+ r a^r, \quad (3.64)$$

где $\Delta^r f(0)$ есть r -я конечная разность:

$$\Delta^0 f(0) \equiv f(0),$$

$$\Delta f(0) \equiv f(1) - f(0),$$

$$\Delta^2 f(0) \equiv f(2) - 2f(1) + f(0),$$

.....

$$\Delta^r f(0) \equiv \sum_{s=0}^r \frac{r! (-1)^s}{(r-s)! s!} f(r-s).$$

С помощью этой теоремы любая функция от a^+a может быть очень просто приведена к нормальной форме.

Доказательство. Рассмотрим разложение функции от a^+a , которая задана в нормальной форме, в следующий степенной ряд:

$$f^{(n)}(a^+a) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r a^+ r a^r. \quad (3.65)$$

Задача состоит в том, чтобы найти коэффициенты разложения C_r . Мы можем записать функцию $f^{(n)}$ в виде разложения (3.65), а не в общей форме (3.43), именно потому, что f специальным образом зависит от аргументов a и a^+ , точнее, только от комбинации a^+a .

Прежде всего покажем, что выражение $a^{+r}a^r$ можно записать в виде

$$a^{+r}a^r = a^+a(a^+a - 1)(a^+a - 2)\dots(a^+a - r + 1). \quad (3.66)$$

Формула (3.66) доказывается методом математической индукции. Предположим, что эта формула справедлива при $r = r'$. Если умножить обе стороны равенства (3.66) справа на $(a^+a - r')$, то левая часть (3.66) приобретает вид

$$a^{+r'}a^{r'}(a^+a - r') = a^{+r'}a^{r'}a^+a - r'a^{+r'}a^{r'}. \quad (3.67)$$

С помощью формул (3.33) получаем

$$a^{r'}a^+ = a^+a^{r'} + r'a^{r'-1}.$$

Поэтому равенство (3.67) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} a^{+r'}a^{r'}(a^+a - r') &= a^{+r'}(a^+a^{r'} + r'a^{r'-1})a - r'a^{+r'}a^{r'} = \\ &= a^{+r'+1}a^{r'+1} = a^+a(a^+a - 1)\dots(a^+a - r'). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что если (3.66) справедливо для r' , то оно также справедливо и для $r' + 1$. Так как выражение (3.66) справедливо для $r' = 1$, то оно справедливо для всех r' . Таким образом, теорема доказана.

Докажем теперь равенство (3.64). Из соотношений (3.65) и (3.66) мы получаем

$$f^{(n)}(a^+a) = \sum_{r=0}^{\infty} C_r a^+a(a^+a - 1)(a^+a - 2)\dots(a^+a - r + 1).$$

Поэтому, если мы применим этот оператор к кет-вектору $|m\rangle$, для которого $a^+a|m\rangle = m|m\rangle$, то получим

$$f^{(n)}(a^+a)|m\rangle = f(m)|m\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} C_r m(m-1)\dots(m-r+1)|m\rangle.$$

Так как ряд обрывается при $r > m$, где m — целое число, то суммирование по r проводится только до $r = m$. Следовательно, имеем

$$f(m)|m\rangle = \sum_{r=0}^m C_r \frac{m!}{(m-r)!} |m\rangle,$$

где $m = 0, 1, 2, \dots$. Таким образом,

$$f(0) = C_0,$$

$$f(1) = C_0 + C_1,$$

$$f(2) = C_0 + 2C_1 + 2! C_2,$$

.....

Отсюда определяется постоянная C_0 . Первые разности равны

$$f(1) - f(0) = C_1 = \Delta f(0),$$

$$f(2) - f(1) = C_1 + 2C_2 = \Delta f(1),$$

.....

Отсюда определяем постоянную C_1 . Вторые разности равны

$$f(2) - 2f(1) + f(0) = 2!C_2 = \Delta^2 f(0),$$

$$f(3) - 2f(2) + f(1) = 2C_2 + 3!C_3 = \Delta^2 f(1),$$

.....

Из них мы получаем C_2 . Если мы продолжим эту процедуру, то найдем, что

$$C_r = \frac{1}{r!} \Delta^r f(0) \equiv \frac{1}{r!} \sum_{s=0}^r \frac{r!}{(r-s)! s!} (-1)^s f(r-s),$$

и, таким образом, теорема доказана.

Частный случай этой теоремы, который часто встречается в дальнейшем, рассмотрен в следующей лемме.

Л е м м а. Если x — параметр, то нормальная форма функции $\exp(xa^+a)$ имеет вид

$$f^{(n)}(a^+a, x) =$$

$$= e^{xa^+a} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(e^x - 1)^r}{r!} a^+ r a^r = N \{ \exp [(e^x - 1) \bar{a}^+ \bar{a}] \}.$$

(3.68)

Прежде всего следует специально подчеркнуть, что

$$N \{ \exp(x\bar{a} + \bar{a}) \} \neq N \{ \exp[(e^x - 1)\bar{a} + \bar{a}] \}. \quad (3.69)$$

На это мы указывали и ранее.

Доказательство 1. Первое доказательство состоит в прямом применении теоремы 10. Так как

$$f(a+a) = e^{xa+a},$$

то

$$f(r-s) = e^{x(r-s)}$$

и (3.64) приобретает вид

$$f^{(n)} = (e^{xa+a})^{(n)} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{r!} \sum_{s=0}^r \frac{r!}{(r-s)! s!} (-1)^s e^{-xs} e^{xr} a^{+r} a^r.$$

Легко видеть, что сумма по s равна

$$(1 - e^{-x})^r = \sum_{s=0}^r \frac{r!}{(r-s)! s!} (-e^{-x})^s,$$

так что

$$\begin{aligned} f^{(n)}(a+a) &= e^{xa+a} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(e^x - 1)^r}{r!} a^{+r} a^r \equiv \\ &\equiv N \{ \exp[(e^x - 1)\bar{a} + \bar{a}] \}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

и лемма доказана. Последнее равенство следует из определения оператора N . Очевидно, что справедливо также разложение

$$e^{xa+a} = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{x^r}{r!} (a+a)^r, \quad (3.71)$$

которое равно (3.70), но имеет другую форму.

Доказательство 2. Приведем функцию

$$f(x) = e^{xa+a} \quad (3.72)$$

к нормальной форме с помощью вспомогательного дифференциального уравнения и техники нормального упорядочения операторов, которая очень полезна для решения некоторых задач.

Продифференцируем обе стороны равенства (3.72) по x и получим

$$\frac{\partial f}{\partial x} = a^+ a f. \quad (3.73)$$

Обычное правило дифференцирования справедливо, потому что $[a^+ a, f(x)] = 0$. Предположим теперь, что мы привели f к нормальной форме и, как всегда, выполняется равенство

$$f = f^{(n)}, \quad (3.74)$$

хотя формы левой и правой частей различны. Если $f^{(n)}$ — нормальная форма оператора, то $\partial f^{(n)} / \partial x$ — также нормальная форма, но функция $a^+ a f^{(n)}$ не приведена к нормальной форме. Мы можем теперь использовать соотношение (3.39а), чтобы привести правую часть (3.73) к нормальной форме. В результате мы получим

$$\frac{\partial f^{(n)}}{\partial x} = a^+ \left[f^{(n)} a + \frac{\partial f^{(n)}}{\partial a^+} \right]. \quad (3.75)$$

Теперь обе части равенства представлены в нормальной форме. Из определения (3.32) функции $g^{(n)}$, где $g^{(n)}$ — функция от a и a^+ в нормальной форме, мы знаем, что

$$N \{g^{(n)}(\bar{a}, \bar{a}^+)\} \equiv g^{(n)}(a, a^+), \quad (3.76)$$

и мы можем записать обе части (3.75) в виде

$$N \left\{ \frac{\partial f^{(n)}}{\partial x} \right\} = N \left\{ \bar{a}^+ \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right) f^{(n)} \right\}. \quad (3.77)$$

Преимущество равенства (3.77) заключается в том, что под знаком оператора N величины a и a^+ становятся обычными коммутирующими переменными (c -числами). Поэтому (3.77) — дифференциальное уравнение в частных производных по обычным переменным, и его решение позволяет получить нормальную форму $f^{(n)}$. Для удобства мы временно опустим символ оператора N и решим уравнение

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \bar{a}^+ \frac{\partial f}{\partial \bar{a}^+} = \bar{a}^+ \bar{a} f, \quad (3.78)$$

где x , \bar{a}^+ , \bar{a} — обычные переменные. Затем применим оператор N к решению:

$$f^{(n)}(x, a^+a) = N\{f\}. \quad (3.79)$$

Это и есть искомая нормальная форма $f^{(n)}$.

Легко решить уравнение (3.78), если сделать следующую замену переменных. Положим

$$\begin{aligned} x + \ln \bar{a}^+ &= \xi, & x &= \frac{1}{2} (\xi + \eta), \\ x - \ln \bar{a}^+ &= \eta, & \bar{a}^+ &= e^{1/2 (\xi - \eta)}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

С помощью обычных правил дифференцирования получаем

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \bar{a}^+ \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} = \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta}. \quad (3.81)$$

В новых переменных уравнение (3.78) приводится к виду

$$2 \frac{\partial f}{\partial \eta} = \bar{a} e^{1/2 (\xi - \eta)} f.$$

После интегрирования получаем

$$2 \ln f = -2\bar{a} e^{1/2 (\xi - \eta)} + g(\xi), \quad (3.82)$$

где $g(\xi)$ — произвольная функция интегрирования, которую можно найти следующим образом. Из равенств (3.80) видно, что если $x = 0$, то $\eta = -\xi$. Если в формуле (3.72) положить $x = 0$, то тогда $f(0, a^+a) = 1$, и из равенства (3.82) для функции $g(\xi)$ получается следующее выражение:

$$g(\xi) = 2\bar{a} e^{\xi}.$$

Если мы подставим это выражение в (3.82) и найдем из него функцию f , перейдя при этом снова к переменным x и \bar{a}^+ , то получим

$$f = \exp[(e^x - 1)\bar{a}^+\bar{a}].$$

Поэтому, в соответствии с равенством (3.79), нормальная форма функции f принимает вид

$$e^{x a^+ a} = f^{(n)} \equiv N\{\exp[(e^x - 1)\bar{a}^+\bar{a}]\}, \quad (3.83)$$

что согласуется с нашим предыдущим результатом. Мы можем записать выражение (3.83) также следующим образом:

$$e^{xa^+a} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^m}{m!} (a^+a)^m = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(e^x - 1)^m}{m!} a^{+m} a^m. \quad (3.84)$$

Следует снова отметить, что

$$N \{ \exp(x\bar{a}^+a) \} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^m}{m!} a^{+m} a^m \quad (3.85)$$

и это разложение не равно $\exp(xa^+a)$.

Разработанная здесь техника нормального упорядочения оказывается полезной в дальнейшем при решении уравнения Шредингера *) и уравнения для статистического оператора (гл. VI), когда гамильтониан является функцией от a и a^+ . Она полезна также и в том случае, когда гамильтониан является явной функцией времени.

3.5. Решение уравнения Шредингера с помощью нормального упорядочения. Гармонический осциллятор с вынуждающей силой

В разделе 1.14 мы показали, как можно решить уравнение Шредингера для неконсервативной системы с помощью техники последовательных приближений (см. (1.211)). В квантовой электронике имеется ряд простых задач, таких, как гармонический осциллятор с вынуждающей силой (см. (3.28)), в которых более удобна техника нормального упорядочения, развитая в двух предыдущих разделах.

Уравнение Шредингера

$$H |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (3.86)$$

имеет решение в форме

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (3.87)$$

*) Непосредственное применение этой техники для решения уравнения Шредингера было подсказано автору доктором Геффнером из Станфордского университета.

где U удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU \quad (3.88)$$

при начальном условии

$$U(t_0, t_0) = I. \quad (3.89)$$

Пусть гамильтониан задан в виде

$$H = H^{(n)}(a, a^+, t), \quad (3.90)$$

т. е. предполагается, что гамильтониан приведен к нормальной форме. На практике обычно это очень легко сделать. В соответствии с (3.43) запишем этот гамильтониан в виде

$$H^{(n)} = \sum_{l, m} h_{lm}(t) a^{+l} a^m, \quad (3.91)$$

где коэффициенты разложения $h_{lm}(t)$ являются c -числами.

Предположим, что функция U приведена к нормальной форме. Как всегда,

$$U = U^{(n)}. \quad (3.92)$$

Уравнение (3.88) можно записать теперь следующим образом:

$$i\hbar \frac{dU^{(n)}}{dt} = \sum_{l, m} h_{lm}(t) a^{+l} a^m U^{(n)}. \quad (3.93)$$

Левая часть этого уравнения записана в нормальной форме, а правая часть не приведена к нормальной форме. Для приведения выражения $a^m U^{(n)}$ к нормальной форме мы можем использовать теорему 8 (см. (3.45)). Тогда уравнение (3.93) принимает вид

$$\begin{aligned} N \left\{ i\hbar \frac{dU^{(n)}}{dt} \right\} &= \sum_{l, m} h_{lm}(t) a^{+l} N \left\{ \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right)^m U^{(n)} \right\} = \\ &= N \left\{ \sum_{l, m} h_{lm}(t) \bar{a}^{+l} \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right)^m U^{(n)} \right\}, \end{aligned} \quad (3.94)$$

где последнее равенство справедливо потому, что функция в правой части задана в нормальной форме. Для того чтобы

просуммировать ряд (3.94), можно использовать выражение (3.91). Таким образом,

$$N \left\{ i\hbar \frac{dU^{(n)}}{dt} \right\} = N \left\{ H^{(n)} (\bar{a}^+, \bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+}, t) U^{(n)} \right\}. \quad (3.95)$$

Это по-прежнему уравнение Шредингера (3.88), но теперь это уже дифференциальное уравнение в обычных переменных (c -числах) t, \bar{a}^+, \bar{a} . Мы свели операторное уравнение (3.88) к обычному уравнению. Оно отличается от (3.88) тем, что в нем в нормальной форме гамильтониана a^+ заменено на \bar{a}^+ и a — на $\bar{a} + \partial/\partial \bar{a}^+$. Таким образом, нужно решить уравнение

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = H^{(n)} \left(\bar{a}^+, \bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+}, t \right) U. \quad (3.96)$$

Тогда решение уравнения (3.95) $U^{(n)}$ получается следующим образом:

$$U^{(n)} = N \{U\}, \quad (3.97)$$

где U — решение уравнения (3.96), которое удовлетворяет условию (3.89). Результат автоматически представлен в нормальной форме.

Этот же метод нормального упорядочения может быть использован для решения уравнения Шредингера в представлении взаимодействия. Предположим, что гамильтониан может быть записан в форме (см. (1.234))

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.98)$$

где для простоты мы предположим, что H_0 не зависит от времени, а H_1 зависит от времени. Снова предполагаем, что гамильтониан уже приведен к нормальной форме. Из соотношения (1.235) следует, что

$$|\psi_S(t)\rangle = U_0(t, t_0) |\psi_I(t)\rangle, \quad (3.99)$$

где в рассматриваемом нами случае

$$U_0(t, t_0) = \exp \left[-\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar} \right]. \quad (3.100)$$

Уравнение Шредингера (1.241) приобретает вид

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = H_{1,I} |\psi_I(t)\rangle, \quad (3.101)$$

где согласно (1.242)

$$H_{1, I} = U_0^+ H_{1, S} U_0, \quad (3.102)$$

причем по-прежнему предполагается, что гамильтониан $H_{1, I}$ задан в нормальной форме. Решение уравнения (3.101) можно записать в виде

$$|\psi_I(t)\rangle = W(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle \quad (3.103)$$

при условии, что функция W удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{dW}{dt} = H_{1, I} W, \quad (3.104)$$

где

$$W(t_0, t_0) = I. \quad (3.105)$$

Уравнение (3.104) выводится так же, как и уравнение (3.88). В результате получается

$$N \left\{ i\hbar \frac{dW^{(n)}}{dt} \right\} = N \left\{ H_{1, I}^{(n)} \left(\bar{a}^+, \bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+}, t \right) W^{(n)} \right\}. \quad (3.106)$$

Чтобы проиллюстрировать рассмотренную выше технику, решим уравнение Шредингера для гармонического осциллятора с вынуждающей силой в представлении взаимодействия. Гамильтониан задан формулой (3.28). Введем обозначения:

$$H_{0, S}^{(n)} = \hbar\omega a^+ a, \quad H_{1, S}^{(n)} = \hbar f(t) (a + a^+),$$

$$H = \hbar\omega a^+ a + \hbar f(t) (a + a^+). \quad (3.107)$$

Для простоты мы опустили энергию нулевых колебаний в (3.28), хотя ее легко можно было бы учесть в нашем рассмотрении.

Из формулы (3.100) получаем

$$U_0(t, t_0) = e^{-i\omega(t-t_0) a^+ a} \quad (3.108)$$

и с помощью выражения (3.102) находим

$$H_{1, I}(t) = \hbar [e^{i\omega(t-t_0) a^+ a} (a + a^+) e^{-i\omega(t-t_0) a^+ a}] f(t) = \\ = \hbar [ae^{-i\omega(t-t_0)} + a^+ e^{i\omega(t-t_0)}] f(t), \quad (3.109)$$

где последнее равенство следует из теоремы 9 (соотношения (3.47)). Отметим, что последняя форма для гамильтониана $H_{1,1}(t)$ в (3.109) является нормальной. Уравнение (3.106) для функции $W^{(n)}$ приобретает вид

$$N \left\{ i\hbar \frac{\partial W^{(n)}}{\partial t} \right\} = \\ = N \left\{ \hbar f(t) \left[\bar{a}^+ e^{i\omega(t-t_0)} + e^{-i\omega(t-t_0)} \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right) \right] W^{(n)} \right\}. \quad (3.110)$$

Для простоты мы опустим оператор N до тех пор, пока не решим уравнение (3.110), а затем снова введем этот оператор и представим с его помощью решение уравнения. Итак, нужно решить уравнение

$$i \frac{\partial W}{\partial t} = \left[g^*(t) \bar{a}^+ + g(t) \left(\bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+} \right) \right] W, \quad (3.111)$$

где введено обозначение

$$g(t) = f(t) e^{-i\omega(t-t_0)}. \quad (3.112)$$

Уравнение (3.111) легко решается, если произвести замену неизвестной функции

$$W = \exp [G(t, \bar{a}, \bar{a}^+)], \quad (3.113)$$

где G — степенное разложение по переменным \bar{a} и \bar{a}^+ . В простом примере, который мы сейчас рассматриваем, пробная функция G выбирается в виде

$$G(t, \bar{a}, \bar{a}^+) = A(t) + B(t) \bar{a} + C(t) \bar{a}^+. \quad (3.114)$$

В данном случае нет необходимости учитывать члены более высокого порядка, в чем читатель легко может убедиться сам. Если мы подставим выражение (3.114) в формулу (3.113), а потом выражение (3.113) — в уравнение (3.111), то после несложных алгебраических преобразований получим

$$i \frac{\partial G}{\partial t} = g^*(t) \bar{a}^+ + g(t) \left(\bar{a} + \frac{\partial G}{\partial \bar{a}^+} \right) \quad (3.115a)$$

или

$$i \frac{dA}{dt} + i \frac{dB}{dt} \bar{a} + i \frac{dC}{dt} \bar{a}^+ = \\ = g^*(t) \bar{a}^+ + g(t) \bar{a} + g(t) C(t). \quad (3.115b)$$

Приравняем теперь коэффициенты при одинаковых степенях \bar{a} и \bar{a}^+ в обеих частях равенства (3.115b) и найдем, что неизвестные функции A , B и C должны удовлетворять следующим уравнениям:

$$i \frac{dA}{dt} = g(t)C, \quad i \frac{dB}{dt} = g(t), \quad i \frac{dC}{dt} = g^*(t). \quad (3.116)$$

Для того чтобы выполнялось условие $W(t_0, t_0) = I$, начальные значения для A , B и C должны быть выбраны следующим образом:

$$A(t_0) = B(t_0) = C(t_0) = 0.$$

Теперь можно записать решения уравнений (3.116), которые удовлетворяют этим начальным условиям:

$$\begin{aligned} A(t) &= - \int_{t_0}^t dt' g(t') \int_{t_0}^{t'} dt'' g^*(t''), \\ B(t) &= -i \int_{t_0}^t g(t') dt', \\ C(t) &= -i \int_{t_0}^t g^*(t') dt' = -B^*(t). \end{aligned} \quad (3.117)$$

Тогда функция $W^{(n)}(t, t_0)$ приобретает вид

$$\begin{aligned} W^{(n)}(t, t_0) &= e^{A(t)} N \{ \exp [B(t) \bar{a}] \exp [C(t) \bar{a}^+] \} \equiv \\ &\equiv e^{A(t)} e^{C(t) a^+} e^{B(t) a}. \end{aligned} \quad (3.118)$$

Очевидно, что это решение представлено в нормальной форме. Если объединить это выражение с функцией U_0 , то получим решение уравнения Шредингера для гармонического осциллятора с вынуждающей силой в следующем виде:

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle,$$

где

$$U(t, t_0) = e^{-i\omega(t-t_0) a^+} e^{C(t) a^+} e^{B(t) a} e^{A(t)}. \quad (3.119)$$

Отметим, что хотя $W^{(n)}$ задано в нормальной форме, но это не относится к функции U . Функцию U легко привести к нормальной форме с помощью формулы (3.46)

теоремы 9. Из этой теоремы следует, что

$$e^{-i\omega(t-t_0)} a^+ a e^{C(t)} a^+ = \\ = \exp [C(t) e^{-i\omega(t-t_0)} a^+] e^{-i\omega(t-t_0)} a^+ a, \quad (3.120)$$

так что (3.119) можно записать следующим образом:

$$U(t, t_0) = e^{A(t)} \exp [C(t) e^{-i\omega(t-t_0)} a^+] e^{-i\omega(t-t_0)} a^+ a e^{B(t) a}. \quad (3.121)$$

Наконец, с помощью (3.68) представим U в нормальной форме:

$$U^{(n)}(t, t_0) = \\ = e^{A(t)} N \{ \exp \{ C(t) e^{-i\omega(t-t_0)} \bar{a}^+ + B(t) \bar{a} + [e^{-i\omega(t-t_0)} - 1] \bar{a}^+ \bar{a} \} \}. \quad (3.122)$$

Очевидно, что с помощью формул (3.119), (3.121) и (3.122) одно и то же решение получено в различных формах. Если бы мы решили эту задачу прямо, используя уравнение (3.95) и экспоненциальное преобразование (3.113), то простую функцию следовало бы выбрать в виде

$$G(\bar{a}, \bar{a}^+) = D(t) + E(t) \bar{a} + F(t) \bar{a}^+ + K(t) \bar{a}^+ \bar{a}, \quad (3.123)$$

и тогда мы сразу получили бы функцию U в нормальной форме.

Другая, более общая техника, предложенная Фейнманом [20] для решения уравнения Шредингера в случае неконсервативных систем, использует представление об упорядочении во времени. Она очень полезна в квантовой электродинамике. Однако для решения тех задач, которые мы рассмотрим в дальнейшем, техника нормального упорядочения оказывается вполне достаточной. Действительно, для доказательства некоторых наших теорем можно было бы использовать теорему Вика [21, 22], которая устанавливает соотношение между упорядочением во времени и нормальным упорядочением. К сожалению, мы не будем обсуждать эти вопросы подробнее, потому что аппарат, который используется для их рассмотрения, довольно сложен.

Простота решения уравнения Шредингера для гармонического осциллятора с вынуждающей силой дает читателю некоторое представление об области применимости

и полезности развитого нами метода нормального упорядочения. Когда в последней главе будут рассчитываться средние значения операторов, преимущества представления операторов в нормальной форме станут более очевидными.

3.6. Уравнение Шредингера для двух независимых пар бозе-операторов

Если бы наши интересы были ограничены одним гармоническим осциллятором, то развитый нами математический аппарат был бы вполне достаточным для такой простой задачи. Однако далее (гл. VII) мы будем интересоваться также системой связанных гармонических осцилляторов, которая является квантовой моделью аттенюатора. Нами также будет рассмотрена модель параметрического усилителя, в которой используются два связанных гармонических осциллятора. В настоящем разделе мы рассмотрим математический аппарат для решения задач такого типа.

Рассмотрим два независимых гармонических осциллятора. Пусть операторы a и a^+ описывают осциллятор с частотой ω_1 и операторы b и b^+ описывают другой осциллятор с частотой ω_2 . Эти операторы удовлетворяют соотношениям коммутации для бозонов

$$[a, a^+] = 1, \quad [b, b^+] = 1. \quad (3.124)$$

Все остальные коммутаторы равны нулю: $[a, b^+] = [a^+, b] = \dots = 0$. В силу независимости систем осцилляторов каждый из операторов a, a^+ коммутирует с каждым из операторов b, b^+ . Мы обобщим теперь метод нормального упорядочения операторов таким образом, чтобы можно было решить уравнение Шредингера для двух связанных гармонических осцилляторов.

Запишем гамильтониан для двух слабо связанных осцилляторов. Он имеет вид [11]

$$H = \hbar\omega_1 a^+ a + \hbar\omega_2 b^+ b + \hbar k (a^+ b^+ + ab), \quad (3.125)$$

где k — коэффициент связи. В этом случае формальное решение для функции $U(t, t_0)$ имеет вид

$$U(t, t_0) = \exp \left[- \frac{iH(t - t_0)}{\hbar} \right], \quad (3.126)$$

ибо гамильтониан H не зависит от времени. Однако, как мы увидим в дальнейшем, эта форма решения очень неудобна для расчета средних значений операторов. Гораздо более полезна нормальная форма для функции U . Поэтому задача состоит в том, чтобы привести функцию U к нормальной форме так, чтобы можно было представить ее в виде разложения по нормальным произведениям:

$$U^{(n)} = \sum_{l, m, p, q} U_{lmprq}(t) a^{+l} b^{+p} a^m b^q. \quad (3.127)$$

Здесь в каждом члене операторы рождения расположены левее операторов уничтожения.

Обобщая очевидным образом результаты предыдущего раздела, можно записать уравнение для $U^{(n)}$ в виде

$$\begin{aligned} N \left\{ i\hbar \frac{dU^{(n)}}{dt} \right\} = \\ = N \left\{ H \left(\bar{a}^+, \bar{a} + \frac{\partial}{\partial \bar{a}^+}, \bar{b}^+, \bar{b} + \frac{\partial}{\partial \bar{b}^+}, t \right) U^{(n)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.128)$$

Решение этого уравнения будем искать в виде

$$U = \exp \{ G(t, \bar{a}, \bar{a}^+, \bar{b}, \bar{b}^+) \}, \quad (3.129)$$

где G выбирается в виде разложения в степенной ряд

$$G = A(t) + B(t) \bar{a} + C(t) \bar{a}^+ + D(t) \bar{b} + E(t) \bar{b}^+ \dots \quad (3.130)$$

Мы предоставляем читателю в виде упражнения найти нормальную форму функции U в случае двух связанных осцилляторов. Эта задача упрощается в представлении взаимодействия.

Возможно, следует отметить, что

$$\frac{\partial^2}{\partial \bar{a}^+ \partial \bar{b}^+} e^G = \left(\frac{\partial^2 G}{\partial \bar{a}^+ \partial \bar{b}^+} + \frac{\partial G}{\partial \bar{a}^+} \frac{\partial G}{\partial \bar{b}^+} \right) e^G.$$

Это соотношение обычно возникает в таких задачах.

3.7. Производящая функция для собственных функций осциллятора. Волновой пакет с минимальной неопределенностью

Мы применим некоторые развитые ранее методы для того, чтобы получить производящую функцию для собственных кет-векторов $|n\rangle$ гармонического осциллятора в координатном представлении. Затем мы покажем, что эта производящая функция представляет собой волновой пакет с минимальной неопределенностью. Мы изучим развитие такого осцилляторного пакета во времени и сравним его с волновым пакетом для свободной частицы (см. раздел 1.19).

Вначале заметим, что, поскольку собственные кет-векторы $\{|n\rangle\}$ образуют полную систему, мы можем разложить произвольный вектор состояния $|\psi\rangle$ в фиксированный момент времени (например, $t = 0$) следующим образом:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad (3.131)$$

где коэффициенты разложения c_n являются c -числами. Для того чтобы найти искомую производящую функцию, выберем определенное состояние $|\psi\rangle$, для которого коэффициенты c_n заданы следующей формулой:

$$c_n = \frac{x^n}{\sqrt{n!}} e^{-x^2/2}. \quad (3.132)$$

Мы предположим, что x — вещественный параметр, хотя возможны и комплексные значения x . Вектор состояния $|\psi\rangle$, который задан коэффициентами c_n , с помощью формулы (2.40) можно представить в виде

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= e^{-x^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-x^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(xa^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = \\ &= e^{-x^2/2} e^{xa^\dagger} |0\rangle, \end{aligned} \quad (3.133)$$

где $|0\rangle$ — состояние вакуума. В последнем равенстве проведено суммирование по индексу n . Нетрудно видеть, что

$$\langle\psi|\psi\rangle = e^{-x^2} \langle 0| e^{xa} e^{xa^\dagger} |0\rangle = 1. \quad (3.134)$$

Действительно, представим оператор $\exp(xa)\exp(xa^+)$ в нормальной форме с помощью формулы (3.20) теоремы 4. Пусть $A = xa$ и $B = xa^+$; тогда

$$e^{xa}e^{xa^+} = e^{xa^+}e^{xa}e^{x^2}, \quad (3.135)$$

ибо $[a, a^+] = 1$. Отсюда получаем

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle 0 | e^{xa^+}e^{xa} | 0 \rangle. \quad (3.136)$$

Функция от операторов представлена теперь в нормальной форме. Преимущество такого представления очевидно благодаря равенствам

$$e^{xa} | 0 \rangle = | 0 \rangle, \quad \langle 0 | e^{xa^+} = \langle 0 | \quad (3.137)$$

(см. задачу 2.4), и, следовательно, $\langle \psi | \psi \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1$.

Если мы выразим вектор состояния в координатном представлении с помощью формулы (3.133), то получим

$$\psi(q') \equiv \langle q' | \psi \rangle = e^{-x^2/2} \langle q' | e^{xa^+} | 0 \rangle, \quad (3.138)$$

где $\langle q' |$ — бра-вектор с собственным значением q' .

Теперь мы покажем, что $\psi(q')$ является производящей функцией для собственных функций оператора энергии осциллятора в координатном представлении. Последние записываются в виде

$$u_n(q') \equiv \langle q' | n \rangle. \quad (3.139)$$

Выражение (3.133) можно записать в виде

$$\psi(q', x) = e^{-x^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\sqrt{n!}} \langle q' | n \rangle, \quad (3.140)$$

так что если мы найдем функцию $\psi(q', x)$ и разложим в степенной ряд по x , то коэффициенты при $e^{-x^2/2}(x^n/\sqrt{n!})$ дадут прямо $u_n(q')$. Поэтому $\psi(q', x)$ — производящая функция для $u_n(q')$.

Теперь мы вычислим функцию $\psi(q')$ из (3.138). С помощью (2.20а) выразим оператор a^+ через переменные p и q . Тогда выражение (3.138) приобретет вид

$$\psi(q') = e^{-x^2/2} \left\langle q' \left| \exp \left[\frac{x(\omega q - ip)}{(2\hbar\omega)^{1/2}} \right] \right| 0 \right\rangle. \quad (3.141)$$

Если мы теперь используем формулу (3.20) из теоремы 4 и положим $A = x (2\hbar\omega)^{-1/2}\omega q$ и $B = -ix (2\hbar\omega)^{-1/2}p$, то в силу равенства $-1/2 [A, B] = -x^2/4$ выражение (3.141) принимает вид

$$\psi(q') = e^{-3x^2/4} \times \\ \times \left\langle q' \left| \exp \left[x \left(\frac{\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} q \right] \exp [-ix (2\hbar\omega)^{-1/2}p] \right| 0 \right\rangle. \quad (3.142)$$

С помощью формулы (1.160) последнее выражение можно записать в виде

$$\psi(q') = \\ = e^{-3x^2/4} \exp \left[x \left(\frac{\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} q' \right] \langle q' | \exp [-ix (2\hbar\omega)^{-1/2}p] | 0 \rangle. \quad (3.143)$$

Согласно (1.130) получаем

$$\left\langle q' \left| \exp \left(\frac{i\xi p}{\hbar} \right) \right. \right\rangle = \left\langle q' + \xi \right|. \quad (3.144)$$

Если положить

$$\xi = -x \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}, \quad (3.145)$$

то формула (3.143) преобразуется к виду

$$\psi(q') = e^{-3x^2/4} \exp \left[x \left(\frac{\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} q' \right] \left\langle q' - x \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left| 0 \right. \right\rangle. \quad (3.146)$$

Но из формулы (2.66) имеем

$$u_0(q') = \langle q' | 0 \rangle = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{\omega q'^2}{2\hbar} \right). \quad (3.147)$$

Поэтому

$$u_0 \left(q' - x \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \right) \equiv \left\langle q' - x \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left| 0 \right. \right\rangle = \\ = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{\omega (q' - x \sqrt{\hbar/2\omega})^2}{2\hbar} \right]. \quad (3.148)$$

Таким образом, выражение (3.146) приобретает следующий вид:

$$\psi(q') = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-3x^2/4} \exp \left[x \left(\frac{\omega}{2\hbar} \right)^{1/2} q' \right] \times \\ \times \exp \left[-\frac{\omega (q' - x \sqrt{\hbar/2\omega})^2}{2\hbar} \right]. \quad (3.149)$$

Это и есть искомая производящая функция для $\langle q' | n \rangle$.

Вектор состояния $|\psi\rangle$, который был использован для получения производящей функции, в то же время представляет собой волновой пакет с минимальной неопределенностью. Для того чтобы убедиться в этом, покажем, что

$$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}, \quad (3.150)$$

где

$$\begin{aligned} (\Delta p)^2 &= \langle \psi | p^2 | \psi \rangle - \langle \psi | p | \psi \rangle^2, \\ (\Delta q)^2 &= \langle \psi | q^2 | \psi \rangle - \langle \psi | q | \psi \rangle^2 \end{aligned} \quad (3.151)$$

и $|\psi\rangle$ определяется формулой (3.133).

Воспользуемся соотношением (3.133):

$$|\psi\rangle = e^{-x^2/2} e^{xa^\dagger} |0\rangle. \quad (3.152)$$

В дальнейшем нам понадобятся средние значения некоторых операторов в состоянии $|\psi\rangle$ (предполагаем, что x вещественно):

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= x, & \langle a^2 \rangle &= x^2, \\ \langle a^\dagger \rangle &= x, & \langle a^{\dagger 2} \rangle &= x^2, \\ \langle a^\dagger a \rangle &= x^2, & \langle a a^\dagger \rangle &= x^2 + 1. \end{aligned} \quad (3.153)$$

Чтобы доказать (3.153), воспользуемся следующим соотношением:

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= \langle \psi | a | \psi \rangle = e^{-x^2} \langle 0 | e^{xa} a e^{xa^\dagger} | 0 \rangle = \\ &= e^{-x^2} \langle 0 | e^{xa} (e^{xa^\dagger} a + x e^{xa^\dagger}) | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.154)$$

где для получения последнего равенства использовано соотношение (3.39а). Так как $a | 0 \rangle = 0$, то последнее выражение с помощью соотношения (3.134) приводится к виду

$$\langle a \rangle = x e^{-x^2} \langle 0 | e^{xa} e^{xa^\dagger} | 0 \rangle = x \langle \psi | \psi \rangle = x.$$

Аналогично, применяя дважды формулу (3.39а), можно показать, что $\langle a^2 \rangle = x^2$. Подобным же образом получаем

$$\langle a^\dagger \rangle = \langle \psi | a | \psi \rangle^* = \langle \psi | a^\dagger | \psi \rangle = x, \quad \langle a^{\dagger 2} \rangle = \langle a^2 \rangle^* = x^2.$$

Для того чтобы определить величину $\langle a^+a \rangle$, выпишем соотношение

$$\langle a^+a \rangle = e^{-x^2} \langle 0 | e^{xa} a^+ a e^{xa^+} | 0 \rangle.$$

Как мы показали выше (см. (3.154)), вектор $a e^{xa^+} | 0 \rangle$ можно представить в виде

$$a e^{xa^+} | 0 \rangle = x e^{xa^+} | 0 \rangle.$$

Следовательно, норма этого вектора равна

$$\langle 0 | e^{xa} a^+ a e^{xa^+} | 0 \rangle = x^2 \langle 0 | e^{xa} e^{xa^+} | 0 \rangle = x^2 e^{x^2}.$$

Последнее равенство возможно в силу соотношения (3.134). Итак,

$$\langle a^+a \rangle = x^2.$$

Так как $aa^+ = 1 + a^+a$, то $\langle aa^+ \rangle = 1 + \langle a^+a \rangle = 1 + x^2$. Таким образом, соотношения (3.153) доказаны.

Из определений операторов a и a^+ (см. (2.20b)) следует, что

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (a^+ + a), \quad q^2 = \frac{\hbar}{2\omega} (a^{+2} + a^2 + aa^+ + a^+a), \quad (3.155)$$

$$p = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} (a^+ - a), \quad p^2 = -\frac{\hbar\omega}{2} (a^{+2}a^2 - aa^+ - a^+a).$$

Из соотношений (3.153) и (3.155) следует, что

$$\langle q \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}} x, \quad \langle p \rangle = 0, \quad (3.156)$$

$$\langle q^2 \rangle = \frac{\hbar}{2\omega} (4x^2 + 1), \quad \langle p^2 \rangle = +\frac{\hbar\omega}{2}.$$

Отсюда мы получаем

$$(\Delta q)^2 = \frac{\hbar}{2\omega}, \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (3.157)$$

и, следовательно, справедливость соотношения (3.150) доказана. Итак, вектор состояния $|\psi(t)\rangle$ представляет собой волновой пакет с минимальной неопределенностью. Он

задан формулой (3.149) в координатном представлении. Средняя энергия пакета, в соответствии с (3.156), имеет вид

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \langle (p^2 + \omega^2 q^2) \rangle = \hbar \omega \left(x^2 + \frac{1}{2} \right). \quad (3.158)$$

При выводе этой формулы использовано известное выражение для гамильтониана осциллятора

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega^2 q^2) = \hbar \omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right). \quad (3.159)$$

Таким образом, мы определили физический смысл параметра x . Он представляет собой среднее значение от оператора $a^+ a$, т. е. среднее число квантов в волновом пакете.

Теперь рассмотрим, как этот волновой пакет изменяется во времени. Решение уравнения Шредингера имеет вид

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t (a^+ a + 1/2)} |\psi(0)\rangle. \quad (3.160)$$

Если в качестве $|\psi(0)\rangle$ мы выберем волновой пакет с минимальной неопределенностью (3.133), то получим

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{-i\omega t a^+ a} e^{-x^2/2} \sum_0^\infty \frac{x^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (3.161)$$

Так как $f(a^+ a) |n\rangle = f(n) |n\rangle$, то

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\omega t/2} e^{-x^2/2} \sum_0^\infty \frac{(x e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-x^2/2} \sum_0^\infty \frac{(x e^{-i\omega t} a^+)^n}{n!} |0\rangle = \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-x^2/2} \exp(x e^{-i\omega t} a^+) |0\rangle, \end{aligned} \quad (3.162)$$

где промежуточные выкладки очевидны. Таким образом, показано, как развивается во времени осцилляторный волновой пакет с минимальной неопределенностью. С помощью техники, только что использованной для $t = 0$, легко показать, что для состояния $|\psi(t)\rangle$ имеют место

соотношения

$$\langle q \rangle = x \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}} \cos \omega t, \quad \langle q^2 \rangle = \langle q \rangle^2 + \frac{\hbar}{2\omega}, \quad (3.163)$$

$$\langle p \rangle = x \sqrt{2\hbar\omega} \sin \omega t, \quad \langle p^2 \rangle = \langle p \rangle^2 + \frac{\hbar\omega}{2},$$

так что

$$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}. \quad (3.164)$$

Таким образом, если в начальный момент времени волновой пакет для гармонического осциллятора обладал минимальной неопределенностью, то и для всех других моментов времени произведение неопределенностей $\Delta p \Delta q$ останется неизменным и равным минимальному значению — $\hbar/2$, т. е. в этом случае волновой пакет не расплывается в отличие от волнового пакета для свободной частицы, который был рассмотрен в гл. I.

Как видно из выражения (3.163), центр волнового пакета совершает простые гармонические колебания точно так же, как классический осциллятор. Квадраты модулей волновых функций в координатном и импульсном представлениях — $|\langle q' | \psi(t) \rangle|^2$ и $|\langle p' | \psi(t) \rangle|^2$ — являются гауссовскими распределениями вероятностей с центрами в $\langle q \rangle$ и $\langle p \rangle$ соответственно, в чем читатель может убедиться самостоятельно. Среднеквадратичные отклонения, соответствующие этим двум распределениям, связаны соотношением (3.164).

3. СПИНОВЫЕ ОПЕРАТОРЫ ПАУЛИ

3.8. Алгебраические свойства спиновых операторов при $s = 1/2$

В разделе 2.6 мы ввели спиновые операторы Паули. Эти операторы подчиняются совершенно иной алгебре, чем бозе-операторы, и в данном разделе мы выясним некоторые их свойства. Хотя на самом деле спин равен $s = \hbar\sigma/2$, но мы и в дальнейшем ради удобства будем называть σ спиновым оператором.

Т е о р е м а 11. Если n — положительное целое число, то

$$(\sigma_+ \sigma_-)^n = \sigma_+ \sigma_-. \quad (3.165)$$

Доказательство. Мы можем легко доказать эту теорему с помощью соотношений (2.80j) и (2.81):

$$\sigma_+\sigma_- + \sigma_-\sigma_+ = 1, \quad \sigma_+^2 = \sigma_-^2 = 0. \quad (3.166)$$

Таким образом, получаем

$$(\sigma_+\sigma_-)^2 = \sigma_+\sigma_-\sigma_+\sigma_- = \sigma_+(1 - \sigma_+\sigma_-)\sigma_- = \sigma_+\sigma_-,$$

и теорему легко доказать методом математической индукции.

Т е о р е м а 12. Если $f(\sigma_+\sigma_-)$ — любая функция от $\sigma_+\sigma_-$, которую можно разложить в степенной ряд по $(\sigma_+\sigma_-)$, то тогда

$$f(\sigma_+\sigma_-) = f(0) + [f(1) - f(0)]\sigma_+\sigma_-. \quad (3.167)$$

Доказательство. Для доказательства мы разложим функцию f в степенной ряд и используем соотношение (3.165). Тогда получим

$$\begin{aligned} f(\sigma_+\sigma_-) &= \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\sigma_+\sigma_-)^n = f_0 + \sum_{n=1}^{\infty} f_n\sigma_+\sigma_- = \\ &= f(0) + \left[\sum_{n=1}^{\infty} f_n - f(0) \right] \sigma_+\sigma_- = f(0) + [f(1) - f(0)]\sigma_+\sigma_-. \end{aligned}$$

Проиллюстрируем эту теорему следующим примером:

$$f(\sigma_+\sigma_-) = e^{-\xi\sigma_+\sigma_-} = 1 + (e^{-\xi} - 1)\sigma_+\sigma_-, \quad (3.168)$$

где ξ — параметр.

Т е о р е м а 13. Если ξ — параметр, то

$$e^{\xi\sigma_z/2}\sigma_+e^{-\xi\sigma_z/2} = \sigma_+e^{\xi}, \quad (3.169a)$$

$$e^{\xi\sigma_z/2}\sigma_-e^{-\xi\sigma_z/2} = \sigma_-e^{-\xi}. \quad (3.169b)$$

Мы докажем эту теорему двумя способами и укажем идею еще одного доказательства.

Доказательство 1. Для этого доказательства мы используем равенство (3.168). С помощью соотношения (2.92) получаем

$$\sigma_+\sigma_- = \frac{1}{2}(1 + \sigma_z). \quad (3.170)$$

Подставляя это выражение в формулу (3.168), мы видим, что

$$e^{-\xi\sigma_z/2} = \frac{1}{2} e^{-\xi/2} (1 + \sigma_z) + \frac{1}{2} e^{\xi/2} (1 - \sigma_z). \quad (3.171)$$

В то же время из соотношений (2.86) и (2.85b) видно, что

$$\sigma_+ \sigma_z = -\sigma_+ = -\sigma_z \sigma_+. \quad (3.172)$$

Если мы умножим выражение (3.171) одновременно слева и справа на σ_+ и примем во внимание (3.172), то найдем, что

$$\sigma_+ e^{-\xi\sigma_z/2} = e^{\xi/2} \sigma_+, \quad (3.173a)$$

$$e^{-\xi\sigma_z/2} \sigma_+ = e^{-\xi/2} \sigma_+. \quad (3.173b)$$

Если мы умножим обе части равенства (3.173b) на $\exp \xi$ и воспользуемся равенством (3.173a), то получим

$$\sigma_+ e^{-\xi\sigma_z/2} = e^{\xi/2} \sigma_+ = e^{\xi} e^{-\xi\sigma_z/2} \sigma_+. \quad (3.174)$$

Наконец, если мы умножим обе части последнего выражения слева на $\exp(\xi\sigma_z/2)$, то получим (3.169a). Аналогично доказывается формула (3.169b), которая по существу является эрмитово сопряженной формуле (3.169a).

Доказательство 2. Определим $\sigma_+(\xi)$ следующим образом:

$$\sigma_+(\xi) = e^{\xi\sigma_z/2} \sigma_+ e^{-\xi\sigma_z/2}. \quad (3.175)$$

Так как любая функция от σ_z коммутирует с σ_z , то мы можем также определить оператор $\sigma_z(\xi)$ с помощью соотношения

$$\sigma_z(\xi) = e^{\xi\sigma_z/2} \sigma_z e^{-\xi\sigma_z/2} \equiv \sigma_z. \quad (3.176)$$

Используя (2.80c), получаем отсюда, что

$$[\sigma_z(\xi), \sigma_+(\xi)] = 2\sigma_+(\xi). \quad (3.177)$$

Если мы затем продифференцируем выражение (3.175) по параметру ξ и используем формулы (3.176) и (3.177), то получим

$$\frac{d\sigma_+(\xi)}{d\xi} = \frac{\sigma_z}{2} \sigma_+(\xi) - \sigma_+(\xi) \frac{\sigma_z}{2} = \frac{1}{2} [\sigma_z(\xi), \sigma_+(\xi)] = \sigma_+(\xi).$$

Так как $\sigma_+(0) = \sigma_+$, как это следует из формулы (3.175), то, интегрируя приведенное выше уравнение, получаем формулу (3.169а). Аналогично доказывается формула (3.169б).

Доказательство 3. Можно также доказать эту теорему, разлагая левые части равенств (3.169а) и (3.169б) с помощью соотношения (3.14) (теорема 3) и используя соотношения коммутации (2.80).

Т е о р е м а 14. Если ξ и η — параметры, то тогда

$$e^{\xi\sigma_z + \eta\sigma_x} = e^{\xi(2\sigma_+ \sigma_- - 1) + \eta(\sigma_+ + \sigma_-)} = \\ = \text{ch} \sqrt{\xi^2 + \eta^2} + \frac{\text{sh} \sqrt{\xi^2 + \eta^2}}{\sqrt{\xi^2 + \eta^2}} (\xi\sigma_z + \eta\sigma_x). \quad (3.178)$$

Доказательство этой и следующей теорем предоставляем читателю в качестве упражнения.

Т е о р е м а 15. Если ξ и η — параметры, то

$$e^{\xi\sigma_+ + \eta\sigma_-} = \text{ch} \sqrt{\xi\eta} + \frac{\text{sh} \sqrt{\xi\eta}}{\sqrt{\xi\eta}} (\xi\sigma_+ + \eta\sigma_-). \quad (3.179)$$

В обеих теоремах параметры ξ и η являются c -числами.

Т е о р е м а 16. Если σ_i и σ_j соответственно i -я и j -я компоненты спинного оператора, то тогда

$$\text{Sp}(\sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{ij}, \quad (3.180a)$$

$$\text{Sp}(\sigma_i) = 0. \quad (3.180b)$$

Доказательство. Из формулы (2.76) при $i \neq j$ имеем $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i$.

Вычислим следы левой и правой частей этого равенства:

$$\text{Sp}(\sigma_i \sigma_j) = -\text{Sp}(\sigma_j \sigma_i) = -\text{Sp}(\sigma_i \sigma_j) = 0 \quad (i \neq j).$$

Последнее равенство следует из (1.73). Если $i = j$, то из (2.77) получаем, что

$$\text{Sp}(\sigma_i^2) = \text{Sp}(I) = 2.$$

Таким образом завершается доказательство (3.180а).

Для того чтобы доказать (3.180b), воспользуемся формулой (2.78). Тогда получим

$$\text{Sp}(\sigma_i \sigma_j) = 2i \text{Sp}(\sigma_k) = 0,$$

так как i, j и k различны.

ЗАДАЧИ

3.1. Показать, что если A и B — некоммутирующие операторы, то имеет место соотношение

$$e^A e^B e^{-A} = \exp(e^A B e^{-A}).$$

3.2. Показать, что если $A = xy + \partial^2/(\partial x \partial y)$ и ξ — вещественная переменная, которая коммутирует с x и y , то справедливы следующие формулы:

$$e^{i\xi A} x e^{-i\xi A} = x \operatorname{ch} \xi + i \operatorname{sh} \xi \frac{\partial}{\partial y},$$

$$e^{i\xi A} y e^{-i\xi A} = y \operatorname{ch} \xi + i \operatorname{sh} \xi \frac{\partial}{\partial x}.$$

3.3. Показать, что если ξ и η — параметры, не зависящие от y , то справедлива следующая формула:

$$\exp \left[\xi \left(\frac{\partial}{\partial y} - \eta y \right) \right] = e^{\eta y^2/2} e^{\xi(\partial/\partial y)} e^{-\eta y^2/2} = e^{-\xi^2 \eta/2} e^{-\xi \eta y} e^{\xi(\partial/\partial y)}.$$

3.4. Привести функцию от бозе-операторов вида

$$f(a, a^\dagger) = a^{17} a^{\dagger 2} a a^\dagger$$

к нормальной форме. Найти $N \{f(\bar{a}, \bar{a}^\dagger)\}$ и сравнить с нормальной формой $f^{(n)}$. Вычислить коммутатор $[a, f(a, a^\dagger)]$.

3.5. Вычислить коммутаторы $[a, f_1]$ и $[a, f_2^{(n)}]$, если a и a^\dagger — бозе-операторы и

$$f_1 = e^{-x a^\dagger a}, \quad f_2^{(n)} = N \left\{ \exp \left[(e^{-x} - 1) \bar{a}^\dagger \bar{a} \right] \right\}$$

Заметим, что $f_1 = f_2^{(n)}$. Показать, что $[a, f_1] = [a, f_2^{(n)}]$.

3.6. Доказать следующие соотношения коммутации для бозе-операторов:

$$[a^\dagger a, a^{\dagger m}] = m a^{\dagger m}, \quad [a^\dagger a, a^m] = -m a^m,$$

где m — целое число.

3.7. Показать, что если $|0\rangle$ — состояние вакуума бозонов и x — параметр, то справедливо следующее равенство:

$$e^{x a^\dagger} f(a^\dagger) |0\rangle = f(a^\dagger + x) |0\rangle,$$

при условии, что функцию $f(a^\dagger)$ можно разложить в степенной ряд по бозе-операторам a^\dagger .

3.8. Показать, что для бозе-операторов имеет место равенство

$$e^{x a^\dagger a} f(a^\dagger) |0\rangle = f(a^\dagger e^x) |0\rangle.$$

3.9. Показать, что если x — параметр и m — целое число, то имеют место следующие соотношения:

$$e^{xa} a^{+m} = (a^{+} + x)^m e^{xa} = N \{ (\bar{a}^{+} + x)^m \exp(x\bar{a}) \},$$

$$e^{xa^{+}} a^m = (a - x)^m e^{xa^{+}}.$$

3.10. Доказать теоремы 14 и 15.

3.11. Показать дифференцированием, что выражение (3.118) является решением уравнения (3.104).

3.12. С помощью техники нормального упорядочения решить уравнение Шредингера для двух связанных осцилляторов с гамильтонианом (3.125). Представить унитарный оператор $U(t, 0)$ в нормальной форме.

3.13. Показать, что оператор $U(t, t_0)$ в формуле (3.119) унитарен для всех моментов времени.

3.14. Показать, что функция $A(t)$ из формулы (3.117) удовлетворяет следующему соотношению:

$$A(t) + A^{*}(t) = - \left| \int_{t_0}^t g(t') dt' \right|^2.$$

3.15. Найти нормальную форму оператора

$$f = e^{\xi a b} e^{\eta a^{+} b^{+}},$$

если ξ и η — параметры и величины (a, a^{+}) и (b, b^{+}) — две независимые пары бозе-операторов.

3.16. Показать, что если подействовать оператором f из задачи 3.15 на состояние вакуума $|0\rangle_a |0\rangle_b \equiv |0, 0\rangle$, где $a|0, 0\rangle = b|0, 0\rangle = 0$, то получим

$$f|0, 0\rangle = \frac{1}{1 - \xi\eta} \exp\left(\frac{\eta a^{+} b^{+}}{1 - \xi\eta}\right) |0, 0\rangle.$$

КВАНТОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

4.1. Введение

В опытах по интерференции и дифракции световых лучей проявляются волновые свойства света, в то время как при поглощении и испускании атомами свет проявляет корпускулярные свойства. Теория излучения может считаться удовлетворительной лишь в том случае, если она единым образом объясняет оба этих противоречивых свойства света. Впервые такую теорию создал Дирак.

В настоящей книге мы не будем углубляться в фундаментальные понятия квантовой теории поля или квантовой электродинамики. Мы интересуемся скорее применением теории квантованного электромагнитного поля к задачам квантовой электроники. Тем не менее читателю необходимо иметь некоторые фундаментальные сведения для того, чтобы понимать, как квантование поля приводит к объединению волновых и корпускулярных свойств излучения. Изложению этих вопросов и будут посвящены настоящая и следующая главы этой книги.

Для наших целей достаточна нековариантная (нерелятивистская) формулировка дираковской теории излучения, изложенная в соответствии с идеями классической работы Ферми [24] и книги Гайтлера [25]. Мы не будем квантовать заряды и токи, являющиеся источниками излучения. Это нужно только в том случае, когда необходимо принимать во внимание реакцию излучения на источник. Квантование зарядов и токов приводит к квантовой электродинамике и вторичному квантованию. В квантовой электронике при ее различных приложениях оказывается возможным пренебречь реакцией излучения и рассматривать заряды и токи классически. Однако в следующей главе мы все же изложим теорию естественной ширины

линии атома и рассмотрим реакцию поля на излучающий атом.

Так как нас интересует феноменологическое использование теории квантованного излучения, то мы начнем с изучения классического LC -контура, возбуждаемого генератором и не обладающего потерями. По аналогии с гармоническим осциллятором мы покажем, как такой контур можно рассматривать квантовомеханически. Потом мы покажем, как нужно квантовать классическую линию связи, не имеющую потерь. После этих вводных примеров мы начнем более общее систематическое изучение задачи о квантовании электромагнитного поля в полости. В разделе 4.4 мы покажем, что классическое поле излучения в вакууме эквивалентно бесконечному набору несвязанных гармонических осцилляторов. Это означает, что квантование поля излучения может быть выполнено аналогично квантованию гармонического осциллятора. Само квантование будет проведено в разделе 4.5. Плотность типов колебаний в полости определена в разделе 4.6.

В разделе 4.7 приведены коммутационные соотношения для полей в вакууме, тесно связанные с теорией измерения и принципом неопределенности. В разделе 4.8 обсуждаются нулевые колебания поля, являющиеся причиной естественного уширения спектральных линий атомов, лэмбовского сдвига и квантовых шумов.

В последних двух разделах будет дано упрощенное рассмотрение взаимодействия поля излучения с зарядами и токами. Это дает читателю возможность понять, как следует рассматривать эмпирические модели квантовой электроники с точки зрения квантовой механики. Весьма общее и строгое изложение феноменологической квантовой электродинамики дано Яухом и Ватсоном [26].

В работах [10], [27] дается более строгое рассмотрение некоторых вопросов, затрагиваемых в настоящей главе.

4.2. Квантование LC -контура, возбуждаемого генератором

С классической точки зрения между колебаниями в LC -контуре, возбуждаемыми внешним генератором, и колебаниями гармонического осциллятора, возбуждаемыми внешним источником, существует большая аналогия. Мы ис-

пользуем эту аналогию для того, чтобы обрисовать метод квантования поля излучения в многомодовой полости без потерь, который будет изложен в разделе 4.4. Генератор квантовать мы не будем, так как и в классической, и в квантовой теориях пренебрегается реакцией контура на генератор.

Классическое «уравнение движения» LC -контура в отсутствие потерь с последовательно включенным генератором напряжения $e(t)$ имеет вид

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \omega_0^2 q = \frac{1}{L} e(t), \quad (4.1)$$

где q — заряд и $\omega_0^2 = (LC)^{-1}$ — резонансная частота контура. Ток $p(t)$ в контуре равен

$$\frac{dq}{dt} = p(t). \quad (4.2a)$$

Используя это соотношение, уравнение (4.1) можно написать в виде

$$\frac{dp}{dt} = -\omega_0^2 q + \frac{1}{L} e(t). \quad (4.2b)$$

Уравнение (4.1) и пара уравнений (4.2a) и (4.2b) являются эквивалентными способами записи законов Кирхгофа для LC -контура с генератором. Если считать, что заряд $q(t)$ соответствует координате, а ток $p(t)$ — импульсу, то уравнения (4.1) и (4.2) одинаково описывают гармонический осциллятор, возбуждаемый внешним источником. Мы используем эту аналогию и будем считать, что уравнения (4.2) представляют собой уравнения движения LC -контура в форме Гамильтона. Если предположить, что гамильтониан имеет вид

$$H(t) = \frac{1}{2} (p^2 + \omega_0^2 q^2) - \frac{1}{L} e(t) q, \quad (4.3)$$

и использовать классические уравнения движения (1.229), то получим уравнения

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p} = p, \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -\omega_0^2 q + \frac{1}{L} e(t), \end{aligned} \quad (4.4)$$

которые совпадают с уравнениями (4.2). Совпадение уравнений (4.4) и (4.2) оправдывает выбор гамильтониана в виде (4.3). Заметим, что гамильтониан и энергия не всегда одно и то же.

Для квантования колебаний в контуре мы и дальше будем придерживаться аналогии его с осциллятором. Заряду и току мы сопоставим некоторые эрмитовы операторы и потребуем, чтобы они удовлетворяли коммутационному соотношению

$$[q, p] = i\hbar. \quad (4.5a)$$

Тем самым колебания в контуре можно считать проквантованными.

Можно ввести также неэрмитовы операторы a и a^+ , которые с помощью соотношения (2.20) выражаются через токи и заряды. Для них коммутационное соотношение имеет вид

$$[a, a^+] = 1. \quad (4.5b)$$

Легко видеть, что гамильтониан выражается через операторы a и a^+ следующим образом:

$$\hat{H}(t) = \hbar\omega_0 \left(a^+a + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar e(t)}{L\sqrt{2\hbar\omega_0}} (a^+ + a). \quad (4.6)$$

Если положить

$$f(t) = -\frac{e(t)}{L\sqrt{2\hbar\omega_0}}, \quad (4.7)$$

то выражение (4.6) совпадет с гамильтонианом гармонического осциллятора, возбуждаемого внешней силой (3.107). Так как уравнение Шредингера для этого случая уже решалось раньше (см. гл. III, (3.119)), то мы этим решением можем воспользоваться. Хотя формализм одинаковый, физический смысл операторов различен. Оператор числа квантов a^+a в осцилляторе становится оператором числа фотонов в LC -контуре, а операторы a и a^+ — операторами уничтожения и рождения фотонов соответственно. Точно так же величины p и q теперь не импульс и координата, а ток и заряд. Таким образом, согласно соотношениям (3.119) состояние контура в момент вре-

мени t и его состояние в момент $t_0 = 0$ связаны соотношением

$$|\psi(t)\rangle = e^{A(t)} e^{-i\omega_0(a^\dagger + a)} e^{C(t)} e^{a^\dagger} e^{B(t)} e^a |\psi(0)\rangle. \quad (4.8)$$

Согласно соотношениям (4.7), (3.112) и (3.117) функции $A(t)$, $B(t)$ и $C(t)$, выраженные через $e(t)$, имеют вид

$$\begin{aligned} A(t) &= - \int_0^t dt' C^*(t') \int_0^{t'} dt'' C(t''), \\ B(t) &= - C^*(t), \\ C(t) &= i (L \sqrt{2\hbar\omega_0})^{-1} \int_0^t e(t') e^{+i\omega_0 t'} dt'. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Как следует из задачи 3.14, имеет место полезное соотношение

$$A(t) + A^*(t) = - |C(t)|^2. \quad (4.10)$$

Рассмотрим специальный случай, когда исходным состоянием контура является так называемое состояние вакуума $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$, когда $a|0\rangle = 0$.

Так как

$$e^{B(t)} e^a |0\rangle = |0\rangle, \quad (4.11)$$

то равенство (4.8) принимает вид

$$|\psi(t)\rangle = e^{A(t)} e^{-i\omega_0 t a^\dagger + a} e^{C(t)} e^{a^\dagger} |0\rangle. \quad (4.12)$$

Это выражение можно несколько преобразовать. Так как имеет место равенство

$$f(a^\dagger + a) |0\rangle = f(0) |0\rangle,$$

то

$$|0\rangle = e^{i\omega_0 t a^\dagger + a} |0\rangle,$$

и, следовательно, выражение (4.12) можно записать в виде

$$|\psi(t)\rangle = e^{A(t)} e^{-i\omega_0 t a^\dagger + a} e^{C(t)} e^{a^\dagger} e^{i\omega_0 t a^\dagger + a} |0\rangle.$$

Преобразовав это соотношение в соответствии с (3.3) (см. теорему 1 в гл. III), получим

$$|\psi(t)\rangle = e^{A(t)} \exp [e^{-i\omega_0 t} a^\dagger C(t) a + e^{i\omega_0 t} a^\dagger a] |0\rangle.$$

С помощью соотношения (3.47b), в котором положено $x = -i\omega_0 t$, легко получить

$$|\psi(t)\rangle = e^{A(t)} \exp [C(t) e^{-i\omega_0 t} a^\dagger] |0\rangle. \quad (4.13)$$

В разделе 3.7 (соотношение (3.133)) мы показали, что состояние вида

$$|\psi\rangle = e^{-x^2/2} e^{xa^\dagger} |0\rangle \quad (4.14)$$

соответствует волновому пакету с минимальной неопределенностью. При этом мы предполагали, что x — действительная величина. Теперь мы покажем, что функция (4.13) также соответствует волновому пакету с минимальной неопределенностью в переменных q — заряд и p — ток.

Сначала покажем, что норма кет-вектора $|\psi(t)\rangle$ равна единице, т. е. $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$. Для этого с помощью формул (4.10) и (4.13) для нормы $|\psi(t)\rangle$ получим следующее выражение:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = e^{-|C(t)|^2} \langle 0 | e^{za} e^{z^* a^\dagger} | 0 \rangle, \quad (4.15)$$

где

$$z^* = C(t) e^{-i\omega_0 t}. \quad (4.16)$$

Используя соотношение (3.20) (см. теорему 4 в гл. III) и коммутационное соотношение $[a, a^\dagger] = 1$, мы можем преобразовать выражение (4.15) к виду

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = e^{-|C(t)|^2} e^{|z|^2} \langle 0 | e^{z^* a^\dagger} e^{za} | 0 \rangle.$$

Если заметить теперь, что

$$e^{za} |0\rangle = |0\rangle, \quad \langle 0 | e^{z^* a^\dagger} = \langle 0 |, \quad (4.17)$$

и учесть формулу (4.16), то можно привести выражение (4.15) к единице.

В качестве упражнения для читателя предлагаем показать (см. соотношения (3.153)), что для состояния

$|\psi(t)\rangle$ вида (4.13) имеют место соотношения

$$\begin{aligned} \langle a \rangle &= \langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle = z^*, & \langle a^2 \rangle &= z^*, \\ \langle a^+ \rangle &= z, & \langle a^{+2} \rangle &= z^2, \\ \langle a^+ a \rangle &= |z|^2 = |C(t)|^2, & \langle a a^+ \rangle &= 1 + |z|^2, \quad (4.18) \\ \langle p \rangle &= i \sqrt{\frac{\hbar \omega_0}{2}} (z - z^*), & \langle q \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2 \omega_0}} (z + z^*), \\ \langle p^2 \rangle &= \frac{\hbar \omega_0}{2} (2|z|^2 + 1 - z^2 - z^{*2}), \\ \langle q^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2 \omega_0} (2|z|^2 + 1 + z^2 + z^{*2}), \\ (\Delta p)^2 &= \frac{\hbar \omega_0}{2}, & (\Delta q)^2 &= \frac{\hbar}{2 \omega_0}. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad (4.19)$$

и поэтому (4.13) представляет собой волновой пакет в переменных заряд — ток с минимальной неопределенностью, причем соотношение (4.19) справедливо в любой момент времени. Таким образом, в противоположность классическому случаю в квантованном LC-контуре ток и заряд не могут быть точно измерены одновременно. Измерение q с точностью Δq дает в p неопределенность $\Delta p = \hbar/2\Delta q$.

Легко видеть, как может возникнуть подобного рода состояние с минимальной неопределенностью. Это происходит в том случае, когда напряжение генератора возбуждает контур, находящийся в вакуумном состоянии. При этом состояние с минимальной неопределенностью возникает независимо от формы внешнего сигнала $e(t)$.

Состояние с минимальной неопределенностью можно рассматривать также и другим способом. В соответствии с общей теорией, развитой в первой главе, вероятность того, что при измерении величины $a^+ a$ в момент t будут получены m фотонов, если точно известно, что в момент $t = 0$ фотонов не было, равна просто

$$P_{m,0}(t) = |\langle m | \psi(t) \rangle|^2 = e^{-|z|^2} |\langle m | e^{z^+ a^+} | 0 \rangle|^2, \quad (4.20)$$

где величины $|\psi(t)\rangle$ и z^* определяются формулами (4.13) и (4.16). Если экспоненциальный оператор разложить в ряд, то, используя соотношения (2.40) и (2.41), можно получить

$$\begin{aligned} \langle m | e^{-z^* a^\dagger} | 0 \rangle &= \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{z^{*l}}{l!} \langle m | a^{\dagger l} | 0 \rangle = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{z^{*l}}{\sqrt{l!}} \langle m | l \rangle = \frac{z^{*m}}{\sqrt{m!}}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Если мы подставим (4.21) в формулу (4.20) и снова используем соотношение (4.16), то получим

$$P_{m,0}(t) = e^{-|C(t)|^2} \frac{[|C(t)|^2]^m}{m!}. \quad (4.22)$$

Эта функция распределения вероятности называется пуассоновским распределением фотонов по энергетическим собственным состояниям. Сумма вероятностей по всем состояниям все время остается равной единице:

$$\sum_{m=0}^{\infty} P_{m,0}(t) = e^{-|C(t)|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[|C(t)|^2]^m}{m!} = 1. \quad (4.23a)$$

Пуассоновское распределение возникает под влиянием напряжения генератора.

Среднее число фотонов в контуре в момент t равно

$$\overline{m(t)} = \sum_{m=0}^{\infty} m P_{m,0}(t) = |C(t)|^2. \quad (4.23b)$$

Сравнивая эту формулу с соответствующей формулой (4.18), видим, что $\overline{m(t)} = \langle a^\dagger a \rangle = |C(t)|^2$. Таким образом, для среднего числа фотонов мы получили один и тот же результат двумя различными способами. Средний квадрат числа фотонов равен

$$\overline{m^2(t)} = \sum_{m=0}^{\infty} m^2 P_{m,0}(t) = \overline{m(t)} [\overline{m(t)} + 1]. \quad (4.23c)$$

Последняя формула характерна для пуассоновского распределения. Дисперсия для волнового пакета в состоянии с минимальной неопределенностью равна

$$(\Delta m)^2 = \overline{m^2(t)} - [\overline{m(t)}]^2 = \overline{m(t)}. \quad (4.23d)$$

В дальнейшем состояние $|\psi(t)\rangle$ мы будем называть состоянием с минимальной неопределенностью или пуассоновским состоянием. Как мы только что видели, оно получается при возбуждении генератором контура, находящегося первоначально в состоянии вакуума. Еще раз уместно напомнить, что волновой пакет в переменных заряд — ток не то же самое, что в переменных координата — импульс.

Мы подробно обсудили состояние контура в момент t . Теперь нужно более подробно исследовать свойства предполагаемого исходного состояния вакуума. Мы обсудим нулевую энергию и нулевые флуктуации заряда и тока в момент $t = 0$. До включения генератора гамильтониан системы имел вид

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 q^2) = \hbar\omega_0 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (4.24)$$

Если задано состояние $|\psi(0)\rangle$ вида $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$, то из формул (4.18) легко получить средние значения заряда, тока и энергии в момент $t = 0$ ($z(0) = 0 = C(0)$):

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= \langle 0 | q | 0 \rangle = 0, & \langle p \rangle &= \langle 0 | p | 0 \rangle = 0, \\ \langle q^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2\omega_0}, & \langle p^2 \rangle &= \frac{\hbar\omega_0}{2}, & \langle a^\dagger a \rangle &= 0, & (4.25) \\ \langle H \rangle &= \frac{\hbar\omega_0}{2}, & (\Delta q)^2 &= \frac{\hbar}{2\omega_0}, & (\Delta p)^2 &= \frac{\hbar\omega_0}{2}. \end{aligned}$$

Как мы видим, в состоянии вакуума средние значения заряда и тока равны нулю, в то время как их средние квадраты не равны нулю. Таким образом, заряд испытывает нулевые флуктуации, определяемые равенством $(\Delta q)^2 = \hbar/2\omega_0$. Ток также испытывает нулевые флуктуации, определяемые равенством $(\Delta p)^2 = \hbar\omega_0/2$. Энергия этих флуктуаций равна $\hbar\omega_0/2$. Если бы величины $\langle q^2 \rangle$ и $\langle p^2 \rangle$ для невозбужденного контура равнялись нулю, как это имеет место в классическом случае, то принцип неопределенности был бы нарушен. Как известно, соотношение $\Delta q \Delta p = \hbar/2$ есть прямое следствие коммутационного соотношения $[q, p] = \hbar/2$. Поэтому нулевые флуктуации величин q и p возникают как следствие квантования контура.

Теперь рассмотрим энергию нулевых колебаний $\hbar\omega_0/2$. Она также возникает вследствие некоммутативности операторов q и p . Однако так как энергия не абсолютна, то ее можно отсчитывать как раз от уровня нулевых колебаний. Это значит, что гамильтониан (4.24) можно переопределить следующим образом:

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 q^2) - \frac{\hbar\omega_0}{2} = \hbar\omega_0 a^+ a. \quad (4.26)$$

Тогда для состояния $|0\rangle$ мы по-прежнему имеем

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \langle 0 | p | 0 \rangle = 0, & \langle q \rangle &= \langle 0 | q | 0 \rangle = 0, \\ \langle p^2 \rangle &= \frac{\hbar\omega_0}{2}, & \langle q^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2\omega_0}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

а средняя энергия равна $\hbar\omega_0 \langle a^+ a \rangle = 0$. Энергия нулевых колебаний исчезла в результате переопределения гамильтониана, а нулевые флуктуации заряда $\langle q^2 \rangle$ и тока $\langle p^2 \rangle$ остались. Они присутствуют всегда, указывая на то, что принцип неопределенности не нарушен. Так как энергия нулевых флуктуаций может быть удалена таким тривиальным образом, то мы в дальнейшем будем ею пренебрегать.

4.3. Квантование линии связи, не имеющей потерь

Другим простым примером контура, легко поддающегося квантовомеханическому рассмотрению, является линия связи в отсутствие потерь. Ее классические «уравнения движения» имеют вид

$$\frac{\partial V}{\partial z} = -L \frac{\partial I}{\partial t}, \quad \frac{\partial I}{\partial z} = -C \frac{\partial V}{\partial t}, \quad (4.28)$$

где $V(z, t)$ — напряжение, $I(z, t)$ — ток, а L и C — индуктивность и емкость на единицу длины. Эти уравнения тривиальным образом сводятся к одному. Напряжение V и ток I удовлетворяют волновым уравнениям

$$\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 V}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial^2 I}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 I}{\partial t^2}, \quad (4.29)$$

где c — скорость распространения волн, определяемая

соотношением

$$c^2 = \frac{1}{LC}. \quad (4.30)$$

Хорошо известно, что волновые уравнения (4.29) имеют решениями волны, распространяющиеся как в прямом, так и в обратном направлении. В зависимости от граничных условий получаются стоячие или бегущие волны. Так как в следующем разделе волновое уравнение исследуется очень подробно, то здесь мы рассмотрим только одно решение уравнений (4.29) в виде плоских волн, распространяющихся в прямом направлении. Это решение мы запишем в виде

$$V(z, t) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2Cz_0}} (ae^{-i\omega t + ikz} + a^*e^{i\omega t - ikz}) = \sqrt{\frac{L}{C}} I(z, t), \quad (4.31)$$

где z_0 — длина рассматриваемой линии, величина a и сопряженная ей величина a^* — произвольные постоянные. Множитель $\sqrt{\hbar\omega/2Cz_0}$ введен для нормировки. Постоянная распространения k для этих волн равна

$$k = \frac{\omega}{c} = \omega \sqrt{LC} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (4.32)$$

($\sqrt{L/C} = Z_0$ — характеристический импеданс линии, λ — длина волны).

Частоту ω будем считать заданной и длину z_0 положим равной целому числу длин волн:

$$z_0 = m\lambda = \frac{2\pi}{k} m, \quad (4.33)$$

где m — фиксированное целое число. Тем самым мы ограничились одним типом колебаний, т. е. волной, бегущей в прямом направлении вдоль оси z .

С помощью соотношений (4.31) и (4.33) мы легко получим, что энергия, накопленная в линии такой длины, равна

$$H = \frac{1}{2} \int_0^{z_0} [CV^2(z, t) + LI^2(z, t)] dz = \int_0^{2\pi m/k} CV^2(z, t) dz. \quad (4.34)$$

Подставляя теперь (4.31) в формулу (4.34), получим

$$H = \hbar \omega a^* a. \quad (4.35)$$

В этом классическом результате множитель $\hbar \omega$ получился из-за специальной нормировки величин V и I . Это значит, что мы энергию просто выразили в единицах $\hbar \omega$.

Определим теперь значение постоянных a и a^* . Определив их, мы с помощью (4.31) полностью определим тип колебаний. В силу этого величины a и a^* можно считать параметрами, описывающими состояние системы. Их можно выразить через две новые действительные величины q и p с помощью обычных соотношений:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (\omega q + ip), \quad a^* = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} (\omega q - ip), \quad (4.36)$$

так что энергия, запасенная в линии, согласно (4.35) и (4.36) имеет вид

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + \omega_0^2 q^2). \quad (4.37)$$

Таким образом, мы показали, что в классическом случае одномодовая линия связи длиной, равной m длинам волн, полностью эквивалентна гармоническому осциллятору. Тип колебаний определяется заданными выше параметрами a и a^* (или q и p). Они указывают на состояние возбуждения данного типа колебаний.

Теперь легко видеть, как проквантовать линию связи. Будем считать величины p и q эрмитовыми операторами, связанными с неэрмитовыми операторами a и a^+ соотношениями (4.36). В соответствии с этим напряжение и ток становятся операторами. Наложим квантовые условия

$$[q, p] = i\hbar, \quad [a, a^+] = 1. \quad (4.38)$$

Тогда все остальное становится очевидным. В гейзенберговской картине операторы $a(t)$ и $a^+(t)$ имеют вид

$$a(t) = e^{i\omega t} a^+ a e^{-i\omega t} a^+ = a e^{-i\omega t}, \quad (4.39)$$

$$a^+(t) = e^{i\omega t} a^+ a^+ e^{-i\omega t} a^+ = a^+ e^{i\omega t},$$

а гамильтониан (без энергии нулевых флуктуаций) равен

$$H = \hbar \omega a^+ a. \quad (4.40)$$

Операторы напряжения и тока в гейзенберговской картине с помощью соотношений (4.31) и (4.39) могут быть представлены в виде

$$V_{\text{H}}(z, t) = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2Cz_0}} [a(t)e^{ikz} + a^+(t)e^{-ikz}] = \sqrt{\frac{L}{C}} I_{\text{H}}(z, t). \quad (4.41)$$

Очевидно, что напряжение и ток, соответствующие одной и той же моде, коммутируют между собой.

Выведем гейзенберговские операторные уравнения движения для $V_{\text{H}}(z, t)$ и $I_{\text{H}}(z, t)$. Они имеют вид

$$i\hbar \frac{\partial V_{\text{H}}}{\partial t} = [V_{\text{H}}, H_{\text{H}}], \quad i\hbar \frac{\partial I_{\text{H}}}{\partial t} = [I_{\text{H}}, H_{\text{H}}], \quad (4.42)$$

где гамильтониан, согласно гейзенберговской картине, имеет вид

$$H_{\text{H}} = \hbar\omega a_{\text{H}}^+ a_{\text{H}} \equiv \hbar\omega a^+ a. \quad (4.43)$$

Так как имеют место соотношения коммутации

$$[a, a^+ a] = a, \quad [a^+, a^+ a] = -a, \quad (4.44)$$

то уравнения (4.42) с помощью соотношений (4.41) и (4.43) приводятся к виду

$$i\hbar \frac{\partial V_{\text{H}}}{\partial t} = \hbar\omega \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2Cz_0}} [a(t)e^{ikz} - a^+(t)e^{-ikz}] = -\frac{i\hbar}{C} \frac{\partial I_{\text{H}}}{\partial z}, \quad (4.45a)$$

$$i\hbar \frac{\partial I_{\text{H}}}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{L} \frac{\partial V_{\text{H}}}{\partial z}. \quad (4.45b)$$

Эти уравнения совпадают с классическими уравнениями (4.28). Таким образом, мы вновь показали формальную эквивалентность между классическими уравнениями движения и гейзенберговскими операторными уравнениями движения.

Состояние системы (одномодовой линии связи) в момент t определяется соотношением

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t a^+ a} |\psi(0)\rangle, \quad (4.46)$$

где $|\psi(0)\rangle$ — начальное состояние возбуждения, а $a^\dagger a$ — оператор числа фотонов для числа фотонов на всей длине линии.

Так как эрмитовы операторы V_H и I_H для данного типа колебаний коммутируют, то они могут быть измерены одновременно. Однако легко показать, что $V_H(z, t)$ и $\partial I_H/\partial z$ не коммутируют.

4.4. Представление классического поля излучения в полости в виде бесконечного набора осцилляторов

В этом разделе мы кратко рассмотрим классическую теорию излучения в полости, не содержащей источников поля. Мы придадим теории каноническую форму и покажем, что поле в полости эквивалентно бесконечному набору гармонических осцилляторов. В следующем разделе мы проведем квантование этого поля, квантуя эти осцилляторы так, как это делалось в предыдущих двух разделах.

Мы будем везде использовать систему единиц МКС. Мы не будем дополнительно определять некоторые символы, которые стали традиционными, считая их и без того известными читателю.

Уравнения Максвелла. Если источники отсутствуют, то электромагнитное поле подчиняется уравнениям Максвелла вида

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (4.47)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (4.48)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0, \quad (4.49)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (4.50)$$

где

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} \quad (4.51)$$

и $\mu_0 \varepsilon_0 = c^{-2}$, а величины μ_0 и ε_0 характеризуют свободное пространство.

Уравнению (4.47) можно удовлетворить тождественно, если положить

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}. \quad (4.52)$$

Точно так же, если

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad } V, \quad (4.53)$$

где \mathbf{A} и V — векторный и скалярный потенциалы, то уравнение (4.48) превращается в тождество.

Так как уравнения Максвелла градиентно инвариантны, то легко показать, что в отсутствие источников можно использовать кулоновскую калибровку потенциалов, которая имеет вид

$$\text{div } \mathbf{A} = 0, \quad V = 0. \quad (4.54)$$

Тогда величины \mathbf{B} и \mathbf{E} определяются только векторным потенциалом \mathbf{A} . В этом случае выражения для полей имеют вид

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad \text{div } \mathbf{A} = 0, \quad (4.55)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad V = 0.$$

Подставляя эти соотношения в уравнение (4.50) и используя (4.51), получим уравнение

$$\nabla^2 \mathbf{A} \equiv \Delta \mathbf{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2}. \quad (4.56)$$

Иными словами, векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяет обычному волновому уравнению. Таким образом, при кулоновской калибровке поле в вакууме определяется волновым уравнением (4.56).

Энергия и импульс поля. Энергия электромагнитного поля, возбужденного в полости, равна

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int (\epsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) d\tau = \\ &= \frac{1}{2} \int \left[\epsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{\mu_0} (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] d\tau, \end{aligned} \quad (4.57)$$

где $d\tau = dx dy dz$ — элемент объема полости, а интегрирование производится по всему ее объему. На основании теоремы Пойнтинга полю в полости можно приписать импульс

$$\mathbf{G} = \frac{1}{c^2} \int [\mathbf{E} \mathbf{H}] d\tau = -\epsilon_0 \int \left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \text{rot } \mathbf{A} \right] d\tau. \quad (4.58)$$

В последнем выражении величины E и H были заменены с помощью формул (4.55).

Разложение векторного потенциала $A(r, t)$ по собственным колебаниям полости. Как уже говорилось, при кулоновской калибровке электрическое и магнитное поля в любой точке (x, y, z) в вакууме определяются значениями A_x, A_y, A_z в этой точке в момент времени t . Если мы в качестве переменных, описывающих поле, возьмем величины A_x, A_y, A_z , то увидим, что число таких переменных оказывается бесконечным. Поэтому мы изложим ниже способ, который позволит описывать поле с помощью бесконечного, но счетного набора переменных.

Пусть поле заключено в полость с идеально проводящими стенками. Для простоты будем считать, что это есть куб с объемом $\tau = L^3$. Излагаемый метод не зависит от формы полости. Если нас будет интересовать поле в свободном пространстве, то после всех вычислений для куба мы можем положить $\tau \rightarrow \infty$ и перейти к результатам, справедливым для свободного пространства. При наличии граничных условий для поля решение волнового уравнения представляет собой бесконечный дискретный набор собственных колебаний. Эти собственные колебания ортогональны и составляют полную систему в том смысле, что произвольное поле в полости может быть представлено суммой собственных колебаний с подходящими амплитудами. Амплитуды этих собственных колебаний мы и будем использовать как переменные, описывающие поле, вместо переменных A_x, A_y и A_z . Поскольку собственные колебания дискретны и их счетное множество, то их амплитуды (новые переменные поля) также образуют счетное множество. Граничные условия порождают дискретный набор собственных колебаний, а это в свою очередь позволяет ввести для описания поля счетное число переменных.

С помощью известного способа разделения переменных можно получить решение волнового уравнения (4.56) в виде

$$A(r, t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0}} \sum_l q_l(t) u_l(r), \quad (4.59)$$

где множитель $\varepsilon_0^{-1/2}$ введен для нормировки.

Подставляя разложение (4.59) в волновое уравнение (4.56), получим для каждого индекса l следующие уравнения:

$$\nabla^2 u_l(\mathbf{r}) + \frac{\omega_l^2}{c^2} u_l(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.60)$$

$$\frac{d^2 q_l}{dt^2} + \omega_l^2 q_l = 0, \quad (4.61)$$

где ω_l^2 — постоянные, возникающие в методе разделения переменных.

Если потребовать, чтобы тангенциальная компонента электрического поля \mathbf{E} и нормальная компонента магнитной индукции \mathbf{B} на стенках полости объема τ и с поверхностью S обращались в нуль, то получится решение в виде стоячих волн. Согласно (4.55) и (4.59) получаем, что на стенках полости

$$u_l|_{\tan} = 0, \quad \text{rot } u_l|_{\text{norm}} = 0. \quad (4.62)$$

Согласно (4.54)

$$\text{div } u_l(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.63)$$

везде внутри полости.

Решение уравнения (4.60), удовлетворяющее граничным условиям (4.62), представляет собой дискретную систему собственных колебаний. Они ортогональны и нормированы на единицу, т. е. имеет место соотношение

$$\int_{\tau} (u_l(\mathbf{r}) u_m(\mathbf{r})) d\tau = \delta_{lm}. \quad (4.64)$$

Для того чтобы векторный потенциал \mathbf{A} был вещественным, необходимо, чтобы функции $u_l(\mathbf{r})$ и $q_l(t)$ также были вещественными.

Для полости кубической формы функции $u_l(\mathbf{r})$ имеют вид $\sin(\mathbf{k}_l, \mathbf{r})$ или $\cos(\mathbf{k}_l, \mathbf{r})$. При другой геометрии полости функции $u_l(\mathbf{r})$ будут представлены другой системой функций. Таким образом, граничные условия и форма полости определяют типы колебаний, различающиеся индексом l . Обычно колебания описывают с помощью трех или четырех различных индексов. В данном случае индекс l , как будет видно дальше, является сокращенным обозначением полного набора этих индексов.

Условие нормировки (4.64) ограничивает свободу при получении выражений для амплитуд u_l . В дальнейшем функции $u_l(\mathbf{r})$ будут считаться полностью известными.

Для описания любой конкретной конфигурации поля необходимо знать амплитуды $q_l(t)$ всех собственных колебаний. Если величины $q_l(t)$ заданы, то полностью определено и поле в полости, ибо в этом случае при известных $q_l(t)$ определены компоненты A_x , A_y и A_z в любой точке пространства и в момент времени t . Поэтому мы будем считать переменные q_l новыми переменными, описывающими поле.

Амплитуды $q_l(t)$ удовлетворяют уравнению (4.61) — уравнению гармонического осциллятора. Поэтому с каждым собственным колебанием полости можно связать электромагнитный осциллятор частоты ω_l . Мы покажем ниже, что полная энергия поля в точности равна энергии бесконечного набора несвязанных электромагнитных осцилляторов.

Подставляя разложение (4.59) в формулу (4.57) для энергии электромагнитного поля в полости, мы получим для нее следующее выражение:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{l,m} \dot{q}_l \dot{q}_m \int_{\tau} (u_l(\mathbf{r}) u_m(\mathbf{r})) d\tau + \\ + \frac{c^2}{2} \sum_{l,m} q_l q_m \int_{\tau} (\text{rot } u_l \text{ rot } u_m) d\tau. \quad (4.65)$$

Первую двойную сумму в выражении (4.65) можно привести с помощью условий (4.64) к одинарной сумме вида $\frac{1}{2} \sum_l \dot{q}_l^2$. Второй интеграл в (4.65) с помощью векторного тождества

$$(\text{rot } u_l \text{ rot } u_m) = (u_m \text{ rot rot } u_l) + \text{div} [u_m \text{ rot } u_l] \quad (4.66)$$

и теоремы Гаусса приводится к виду

$$\int_{\tau} (u_m \text{ rot rot } u_l) d\tau + \int_S ([u_m \text{ rot } u_l] dS), \quad (4.67)$$

где dS — элемент площади стенки полости. В силу граничных условий (4.62) поверхностный интеграл обращается

в нуль. Первый интеграл в (4.67) с помощью соотношений (4.60) и (4.64) и хорошо известного тождества векторного анализа преобразуется к виду

$$\int \{(\mathbf{u}_m \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u}_l) - \nabla^2 \mathbf{u}_l\} d\tau = \frac{\omega_l^2}{c^2} \int (\mathbf{u}_l \mathbf{u}_m) d\tau = \frac{\omega_l^2}{c^2} \delta_{lm}. \quad (4.68)$$

Подставляя формулу (4.68) в выражение (4.65), мы получим следующее выражение для гамильтониана поля:

$$H = \frac{1}{2} \sum_l (\dot{q}_l^2 + \omega_l^2 q_l^2) \equiv \sum_l H_l. \quad (4.69)$$

Так как величина H_l является энергией гармонического осциллятора с частотой ω_l , то, следовательно, электромагнитное поле в полости эквивалентно бесконечному набору не связанных между собой электромагнитных осцилляторов.

Гамильтоновы уравнения движения для l -го осциллятора имеют вид

$$\frac{\partial H_l}{\partial q_l} = -\dot{p}_l = \omega_l^2 q_l, \quad \frac{\partial H_l}{\partial p_l} = \dot{q}_l = p_l. \quad (4.70)$$

Таким образом, величины p_l и q_l представляют собой канонически сопряженные переменные.

Теперь мы можем, как и раньше, для каждого собственного колебания ввести две комплексно сопряженные переменные a_l и a_l^\dagger по известным формулам:

$$q_l = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l}} (a_l^\dagger + a_l), \quad a_l = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_l}} (\omega_l q_l + i p_l), \quad (4.71)$$

$$p_l = i \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2}} (a_l^\dagger - a_l), \quad a_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_l}} (\omega_l q_l - i p_l).$$

Эти переменные подчиняются уравнениям

$$\frac{da_l(t)}{dt} = -i\omega_l a_l(t), \quad \frac{da_l^\dagger(t)}{dt} = i\omega_l a_l^\dagger(t), \quad (4.72)$$

которые имеют следующие решения:

$$a_l(t) = a_l e^{-i\omega_l t}, \quad a_l^\dagger(t) = a_l^\dagger e^{i\omega_l t}. \quad (4.73)$$

В переменных a_l и a_l^\dagger гамильтониан (4.69) выглядит следующим образом:

$$H = \sum_l \frac{1}{2} \hbar \omega_l (a_l^\dagger a_l + a_l a_l^\dagger). \quad (4.74)$$

В этом чисто классическом рассмотрении переменные a_l и a_l^\dagger , конечно, коммутируют между собой.

Таким способом мы подготовили классическую систему к квантовомеханическому рассмотрению, которое проведено в следующем разделе. В конечном итоге оказалось, что электромагнитное поле внутри полости можно представить в виде системы стоячих волн. При этом величины \mathbf{A} , \mathbf{E} и \mathbf{H} принимают вид

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_l q_l(t) \mathbf{u}_l(r), \\ \mathbf{E} &= -\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0}} \sum_l p_l(t) \mathbf{u}_l(r), \\ \mathbf{H} &= \frac{1}{\mu_0 \sqrt{\epsilon_0}} \sum_l q_l(t) \text{rot } \mathbf{u}_l(r). \end{aligned} \quad (4.75)$$

Разложение поля по плоским волнам. Электромагнитное поле иногда удобнее выразить через бегущие, а не через стоячие волны.

Для этого мы представим векторный потенциал в виде суперпозиции плоских волн:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(r, t) = \sum_l \sum_{\sigma=1}^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} \mathbf{e}_{l\sigma} \{ a_{l\sigma} \exp [i(\mathbf{k}_l r - \omega_l t)] + \\ + a_{l\sigma}^\dagger \exp [-i(\mathbf{k}_l r - \omega_l t)] \}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Векторы $\mathbf{e}_{l\sigma}$ и числа $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^\dagger$ — константы. Вектор \mathbf{k}_l является постоянной распространения, причем если

$$\mathbf{k}_l^2 = \frac{\omega_l^2}{c^2}, \quad (4.77)$$

то каждый член ряда (4.76) удовлетворяет известному волновому уравнению.

Из условия кулоновской калибровки $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ следует, что

$$(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l) = 0. \quad (4.78)$$

Это условие называется условием поперечности электромагнитных волн. Направление распространения плоской волны определяется вектором \mathbf{k}_l . Так как электрическое поле $\mathbf{E} = -\partial \mathbf{A} / \partial t$, то в отсутствие источников из соотношений (4.76) и (4.78) следует, что векторы \mathbf{E} и \mathbf{A} перпендикулярны направлению распространения. Это вспомогательное условие является следствием кулоновской калибровки электромагнитного поля.

Единичные векторы \mathbf{e}_{l1} и \mathbf{e}_{l2} указывают на поляризацию плоской волны. Так как обе поляризации независимы, то полное поле (4.76) является суммой полей с обеими поляризациями. Для удобства векторы \mathbf{e}_{l1} и \mathbf{e}_{l2} выберем перпендикулярными:

$$(\mathbf{e}_{l1} \mathbf{e}_{l2}) = 0. \quad (4.79)$$

Вместо вектора \mathbf{k}_l часто бывает удобно использовать единичный вектор того же направления

$$\mathbf{k}_l = \frac{\mathbf{k}_l}{|\mathbf{k}_l|}. \quad (4.80)$$

Тогда соотношения (4.78) и (4.79) могут быть записаны в виде

$$(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{l\sigma'}) = \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \sigma, \sigma' = 1, 2, \quad (\mathbf{k}_l \mathbf{e}_{l\sigma}) = 0. \quad (4.81)$$

Часто бывает удобно вместо обычных граничных условий ввести так называемые периодические граничные условия. Если \mathbf{i} , \mathbf{j} и \mathbf{k} — единичные векторы, параллельные ребрам куба, то радиус-вектор и волновой вектор имеют вид

$$\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}, \quad \mathbf{k}_l = k_{lx}\mathbf{i} + k_{ly}\mathbf{j} + k_{lz}\mathbf{k}.$$

Периодические граничные условия требуют, чтобы имели место следующие равенства:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r} + L\mathbf{i}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r} + L\mathbf{j}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r} + L\mathbf{k}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Эти равенства будут справедливы в том случае, если

$$\mathbf{k}_l = \frac{2\pi}{L} (l_1 \mathbf{i} + l_2 \mathbf{j} + l_3 \mathbf{k}), \quad (4.82)$$

где l_1 , l_2 и l_3 — целые числа из интервала от $-\infty$ до $+\infty$.

Таким образом, периодические граничные условия приводят к дискретному набору значений постоянной распространения.

Каждой тройке целых чисел (l_1, l_2, l_3) соответствуют две бегущие волны — по одной для каждой поляризации. Последнее следует из соотношения (4.76). Если от тройки чисел (l_1, l_2, l_3) перейти к тройке чисел $(-l_1, -l_2, -l_3)$ (для краткости будем писать $l \rightarrow -l$), то согласно формуле (4.82) получим, что

$$\mathbf{k}_{-l} = -\mathbf{k}_l, \quad (4.83)$$

а согласно соотношению (4.77)

$$\omega_{-l} \equiv \omega_l. \quad (4.84)$$

Таким образом, числа l и $-l$ соответствуют двум бегущим волнам, распространяющимся в противоположных направлениях. И те и другие волны содержатся в выражении (4.76).

Сумму \sum_l следует, таким образом, понимать как сокращенное обозначение выражения вида

$$\sum_l \equiv \sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \sum_{l_2=-\infty}^{\infty} \sum_{l_3=-\infty}^{\infty}. \quad (4.85)$$

Набор из четырех чисел (l_1, l_2, l_3, σ) соответствует бегущей волне с данной поляризацией.

Легко показать, что векторный потенциал действителен.

Покажем теперь, что векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и электрическое поле $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ могут быть выражены через канонически сопряженные переменные. С этой целью введем обозначения

$$a_{l\sigma}(t) = a_{l\sigma} e^{-i\omega_l t}, \quad a_{l\sigma}^{\dagger}(t) = a_{l\sigma}^{\dagger} e^{i\omega_l t} \quad (4.86)$$

и функции

$$u_{l\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{e}_{l\sigma} \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r})}{\sqrt{\tau}}, \quad u_{l\sigma}^*(\cdot) = \frac{\mathbf{e}_{l\sigma} \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})}{\sqrt{\tau}}, \quad (4.87)$$

удовлетворяющие соотношению ортонормировки вида

$$\int_{\tau} (u_{l\sigma}^*(\mathbf{r}) u_{l'\sigma'}(\mathbf{r})) d\tau = \delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (4.88)$$

Вместо канонически сопряженных переменных $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ можно ввести также действительные переменные $p_{l\sigma}$ и $q_{l\sigma}$ по формулам

$$a_{l\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_l}} (\omega_l q_{l\sigma} + i p_{l\sigma}), \quad (4.89)$$

$$a_{l\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_l}} (\omega_l q_{l\sigma} - i p_{l\sigma}).$$

Используя тождество

$$\begin{aligned} \text{rot} [\mathbf{e}_{l\sigma} \exp(\pm i\mathbf{k}_l \mathbf{r})] &= \mp i [\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] \exp(\pm i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) \equiv \\ &\equiv \mp i \frac{\omega_l}{c} [\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] \exp(\pm i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) \end{aligned}$$

и соотношения (4.76) и (4.86), мы можем получить для электрического и магнитного полей следующие выражения:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = i \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2\epsilon_0\tau}} \mathbf{e}_{l\sigma} \times \\ &\times \{a_{l\sigma}(t) \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) - a_{l\sigma}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})\}, \quad (4.90a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{1}{\mu_0} \text{rot} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i}{c\mu_0} \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2\epsilon_0\tau}} [\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] \times \\ &\times [a_{l\sigma}(t) \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) - a_{l\sigma}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})], \quad (4.90b) \end{aligned}$$

где $|\mathbf{k}_l| = \omega_l/c$ и $\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{k}_l = k_l$.

Гамильтониан для поля в полости имеет вид

$$\begin{aligned}
 H &= -\frac{1}{2} \int_{\tau} (\varepsilon_0 \mathbf{E}^2 + \mu_0 \mathbf{H}^2) d\tau = \frac{1}{2} \sum_{l, \sigma} \hbar \omega_l (a_{l\sigma} a_{l\sigma}^{\dagger} + a_{l\sigma}^{\dagger} a_{l\sigma}) = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{l, \sigma} (p_{l\sigma}^2 + \omega_l^2 q_{l\sigma}^2). \quad (4.91)
 \end{aligned}$$

Вывод этого соотношения дан в приложении А. Хотя в классической теории множители a^{\dagger} и a коммутируют между собой, мы сохранили все же их порядок в формуле (4.91), для того, чтобы эта формула была пригодна и в том случае, когда множители a^{\dagger} и a будут рассматриваться нами как некоммутирующие операторы.

Как и при исследовании стоячих волн (4.74), каждому собственному электромагнитному колебанию полости можно сопоставить осциллятор, для которого переменные $p_{l\sigma}$ и $q_{l\sigma}$ являются канонически сопряженными. Полная энергия поля равна сумме энергии отдельных собственных колебаний.

В силу формул (4.91) канонические гамильтоновы уравнения движения для поля принимают вид

$$\frac{\partial H}{\partial p_{l\sigma}} = \dot{q}_{l\sigma} = p_{l\sigma}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_{l\sigma}} = -\dot{p}_{l\sigma} = \omega_l^2 q_{l\sigma}. \quad (4.92)$$

Как и следовало ожидать, они совпадают с уравнениями движения осциллятора.

Множитель $(\hbar/2\omega_l\varepsilon_0\tau)^{1/2}$ в соотношении (4.76) был выбран так, чтобы гамильтониан H измерялся в единицах $\hbar\omega_l$.

Импульс поля. Выражение для импульса поля

$$\mathbf{G} = \frac{1}{c^2} \int_{\tau} [\mathbf{E} \times \mathbf{H}] d\tau \quad (4.93)$$

выводится в приложении Б. Оно имеет следующий вид:

$$\mathbf{G} = \frac{1}{2} \sum_{l, \sigma} \hbar \mathbf{k}_l (a_{l\sigma} a_{l\sigma}^{\dagger} + a_{l\sigma}^{\dagger} a_{l\sigma}). \quad (4.94)$$

Единицы измерения снова подбираются так, чтобы импульс измерялся в единицах $\hbar \mathbf{k}_l$, хотя наш анализ все еще остается классическим.

4.5. Квантование электромагнитного поля в вакууме

После всего изложенного выше становится очевидным способ квантования электромагнитного поля. Для этого классическим переменным $p_{l\sigma}$ и $q_{l\sigma}$ сопоставляем эрмитовы операторы. Так как из экспериментов известно, что фотоны являются бозонами, то мы постулируем, что операторы $q_{l\sigma}$ и $p_{l\sigma}$ удовлетворяют бозонным коммутационным соотношениям. Для неэрмитовых операторов $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ эти соотношения имеют вид

$$[a_{l\sigma}, a_{l'\sigma'}^+] = \delta_{ll'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (4.95)$$

$$[a_{l\sigma}, a_{l'\sigma'}] = [a_{l\sigma}^+, a_{l'\sigma'}^+] = 0. \quad (4.96)$$

Таким образом, в силу независимости осцилляторов поля операторы $a_{l\sigma}$ и $a_{l'\sigma'}^+$, соответствующие разным осцилляторам, коммутируют между собой, но операторы, соответствующие одному и тому же осциллятору, подчиняются соотношению (4.95).

Как уже указывалось ранее, уровень начала отсчета энергии поля может быть выбран так, чтобы в гамильтониане поля отсутствовала энергия нулевых колебаний. Тогда гамильтониан принимает вид

$$H = \sum_{l,\sigma} \hbar \omega_l a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}. \quad (4.97)$$

Импульс поля в этом случае согласно формулам (4.94) и (4.95) равен

$$\mathbf{G} = \sum_{l,\sigma} \hbar \mathbf{k}_l \left(a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} + \frac{1}{2} \right).$$

Однако так как $\mathbf{k}_{-l} = -\mathbf{k}_l$, то сумма $\sum_l \hbar \mathbf{k}_l = 0$, и тогда выражение для импульса принимает вид

$$\mathbf{G} = \sum_{l,\sigma} \hbar \mathbf{k}_l a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}. \quad (4.98)$$

Теперь нам следует использовать все выведенные ранее соотношения для бозонов. Некоторое обобщение заключается в том, что теперь имеется бесконечный набор неза-

висимых осцилляторов поля, в то время как раньше мы рассматривали один осциллятор. Операторы $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ будем интерпретировать соответственно как операторы уничтожения и рождения фотона частоты ω_l , движущегося в направлении k_l с поляризацией σ . Оператор $N_{l\sigma} = a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}$ представляет собой оператор числа фотонов, соответствующих собственному колебанию типа (l, σ) . Собственные значения $N_{l\sigma}$ равны $n_{l\sigma} = 0, 1, 2, \dots$. Согласно соотношению (4.97) энергия фотона в состоянии (l, σ) равна $\hbar\omega_l$, и при этом фотон согласно (4.98) имеет импульс $\hbar k_l$. Таким образом, фотон оказывается подобным частице, движущейся со скоростью c .

Так как собственные колебания полости независимы, то полный вектор состояния может быть записан как произведение векторов состояния каждого собственного колебания, т. е. вектор состояния электромагнитного поля в полости может быть записан в виде

$$|n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_\infty\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle, \quad (4.99)$$

где каждый индекс 1, 2, ... заменяет собой четверку целых чисел (l_1, l_2, l_3, σ) .

Вектор состояния системы невзаимодействующих бозонов должен быть симметричен относительно перестановки любых двух бозонов. Можно показать [10, 23], что, приписывая каждому состоянию определенное число бозонов, мы получим волновую функцию с правильной симметрией, так что соотношение (4.99) будет правильно описывать систему невзаимодействующих бозонов. Мы не будем рассматривать детали этого вопроса, хотя именно такого рода исследование и оправдывает введение операторов $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ как операторов уничтожения и рождения бозонов [23].

Действие операторов $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ на векторы состояния (4.99) описывается соотношениями

$$\begin{aligned} a_{l\sigma}^+ |\dots, n_{l\sigma}, \dots\rangle &= \sqrt{n_{l\sigma} + 1} |\dots, n_{l\sigma} + 1, \dots\rangle, \\ a_{l\sigma} |\dots, n_{l\sigma}, \dots\rangle &= \sqrt{n_{l\sigma}} |\dots, n_{l\sigma} - 1, \dots\rangle, \\ a_{l\sigma} |\dots, 0, \dots\rangle &= 0, \\ N_{l\sigma} |\dots, n_{l\sigma}, \dots\rangle &= n_{l\sigma} |\dots, n_{l\sigma}, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (4.100)$$

При выполнении соотношений (4.100) соответствующие векторы состояний оказываются нормированными на единицу.

Как и в случае одного осциллятора, все эти операторы рассматриваются пока в шредингеровском представлении. Однако легко можно перейти и к гейзенберговскому представлению или представлению взаимодействия для этих операторов. Так, например, гейзенберговские уравнения движения для $a_{l\sigma}(t)$ имеют вид

$$i\hbar \frac{da_{l\sigma}(t)}{dt} = [a_{l\sigma}(t), H_H] = -i\omega_l a_{l\sigma}(t). \quad (4.101)$$

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_S(t)\rangle}{\partial t} = H_S |\psi_S(t)\rangle. \quad (4.102)$$

Если H_S для бесконечного числа невзаимодействующих осцилляторов определяется соотношением (4.97), то

$$|\psi_S(t)\rangle = \exp\left(-i \sum_{l,\sigma} a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} \omega_l t\right) |\psi(0)\rangle. \quad (4.103)$$

Произвольное начальное состояние системы можно представить в виде

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} c(n_1, n_2, \dots, n_\infty, 0) |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle, \quad (4.104)$$

где вместо пары индексов l, σ мы употребляем один индекс l . Тогда соотношение (4.103) принимает вид

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} c(n_1, n_2, \dots, n_\infty, 0) \times \\ \times \exp\left(-i \sum_{l,\sigma} n_{l\sigma} \omega_l t\right) |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle. \quad (4.105)$$

Для собственных кет-векторов выполняются также соотношения полноты и ортонормированности

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_\infty| = I, \\ \langle n_1, n_2, \dots, n_\infty | n'_1, n'_2, \dots, n'_\infty \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \quad (4.106)$$

4.6. Спектральная плотность собственных колебаний

В дальнейшем нам будет необходимо знать число собственных колебаний полости объемом τ , приходящихся на заданный частотный интервал. Информация об этом содержится в формуле (4.82):

$$\mathbf{k}_l = \frac{2\pi}{L} (l_1 \mathbf{i} + l_2 \mathbf{j} + l_3 \mathbf{k}). \quad (4.107)$$

Каждому набору целых чисел (l_1, l_2, l_3) соответствуют две бегущие волны с двумя различными поляризациями. Каждое

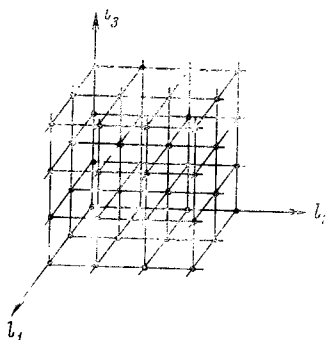


Рис. 5. Диаграмма нормальных колебаний в полости. Каждая тройка целых чисел (l_1, l_2, l_3) соответствует колебанию определенной поляризации.

собственное колебание с заданной поляризацией можно представить, как это показано на рис. 5, точкой в трехмерном пространстве. В элементе объема $dl_1 dl_2 dl_3$ этого пространства содержится dN собственных колебаний:

$$dN = 2 dl_1 dl_2 dl_3. \quad (4.108)$$

Используя формулу (4.107), мы получим, что, с другой стороны,

$$dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 dk_x dk_y dk_z. \quad (4.109)$$

Так как при $L \rightarrow \infty$ (т. е. при переходе к свободному пространству) величины l_1/L , l_2/L и l_3/L становятся практически непрерывными переменными, то суммирование по дискретным значениям l (l_1, l_2, l_3) можно заменить интегрированием:

$$\frac{1}{L^3} \sum_l (\dots) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} (\dots) dk_x dk_y dk_z. \quad (4.110)$$

Переходя от прямоугольных координат (k_x, k_y, k_z) к сферическим, будем иметь

$$\mathbf{k} = k \{ \sin \theta \cos \varphi; \sin \theta \sin \varphi; \cos \theta \}, \quad (4.111)$$

и, следовательно, элемент объема в k -пространстве будет равен

$$dk_x dk_y dk_z = k^2 dk \sin \theta d\theta d\varphi \equiv k^2 dk d\Omega, \quad (4.112)$$

где $d\Omega$ — элемент телесного угла в направлении k .

Таким образом, формулу (4.109) можно переписать в виде

$$dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 k^2 dk d\Omega. \quad (4.113)$$

Общее число собственных колебаний равно

$$N = \int dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int_0^\infty k^2 dk \int_0^{4\pi} d\Omega \rightarrow \infty. \quad (4.114)$$

В соотношении (4.113) dN равно числу собственных колебаний в объеме L^3 , приходящихся на телесный угол $d\Omega$ около вектора распространения k , модуль которого находится в интервале от k до $k + dk$. Так как $\omega^2 = c^2 k^2$, то можно найти число собственных колебаний, приходящихся на частотный интервал от ω до $\omega + d\omega$. Поскольку

$$k^2 dk = \frac{\omega^2}{c^3} d\omega, \quad (4.115)$$

то

$$dN = 2 \left(\frac{L}{2\pi c} \right)^3 \omega^2 d\omega d\Omega = 2 \left(\frac{L}{c} \right)^3 \nu^2 d\nu d\Omega, \quad (4.116)$$

где $\omega = 2\pi\nu$. Таким образом, число осцилляторов в единице объема, приходящихся на телесный угол $d\Omega$ и на частотный интервал от ω до $\omega + d\omega$, равно

$$g(\omega) d\omega = \frac{2\omega^2}{(2\pi c)^3} d\omega, \quad (4.117)$$

где функция $g(\omega)$ называется спектральной плотностью собственных колебаний.

4.7. Коммутационные соотношения для полей в вакууме, относящиеся к одному моменту времени

В разделе 1.13 мы видели, что коммутационные соотношения для наблюдаемых величин тесно связаны с проблемой измерения этих величин. Для электромагнитного поля физически наблюдаемыми величинами являются $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$ и $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$. В силу сопряженности операторов $a_{l\sigma}^+$ и $a_{l\sigma}$ и согласно выражениям (4.90) векторы электромагнитного поля представляются эрмитовыми операторами. Воспользовавшись коммутационными соотношениями для операторов $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$, можно найти коммутационные соотношения для физически наблюдаемых величин \mathbf{E} и \mathbf{H} . Это позволит выяснить квантовомеханические ограничения на измерение этих величин, обусловленные принципом неопределенности. Подобные вопросы играют важную роль в квантовой электронике.

Согласно выражению (4.76) векторный потенциал также представляется эрмитовым оператором, хотя в классической теории он не является физически наблюдаемой величиной. Это обстоятельство оказывается очень полезным для теории, и поэтому данный раздел мы начнем с вывода коммутационных соотношений для векторов \mathbf{D} и \mathbf{A} .

Коммутационные соотношения для \mathbf{D} и \mathbf{A} , относящиеся к одному моменту времени. Если условиться, что оператор $a_{l\sigma}(t)$ соответствует оператору в гейзенберговском представлении, а оператор $a_{l\sigma} \equiv a_{l\sigma}(0)$ соответствует оператору в шредингеровском представлении в момент $t = 0$, то согласно соотношению (4.76) векторный потенциал в шредингеровском представлении будет иметь вид

$$\mathbf{A}_S(\mathbf{r}, 0) = \sum_{l,\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} \mathbf{e}_{l\sigma} [a_{l\sigma} \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) + a_{l\sigma}^+ \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})]. \quad (4.118a)$$

Хотя в шредингеровском представлении фиксированный момент времени t_0 может быть произвольным, его без потери общности можно положить равным нулю.

Согласно соотношению (4.90a) оператор электрической индукции $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$ в шредингеровском представлении

имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_S(\mathbf{r}, 0) &= \\ &= i \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \hbar \omega_l}{2\tau}} \mathbf{e}_{l\sigma} [a_{l\sigma} \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) - a_{l\sigma}^+ \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (4.118b)$$

Пусть $A_i(\mathbf{r})$ есть i -я компонента вектора $\mathbf{A}_S(\mathbf{r}, 0)$, а $D_j(\mathbf{r}')$ — j -я компонента вектора $\mathbf{D}_S(\mathbf{r}, 0)$. Поскольку как в гейзенберговском, так и в шредингеровском представлениях операторы $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ подчиняются коммутационным соотношениям (4.95) и (4.96), то для коммутатора операторов $A_i(\mathbf{r})$ и $D_j(\mathbf{r}')$ мы получим

$$\begin{aligned} [A_i(\mathbf{r}), D_j(\mathbf{r}')] &= \\ &= -\frac{i\hbar}{2\tau} \sum_{l, \sigma} (\mathbf{e}_{l\sigma})_i (\mathbf{e}_{l\sigma})_j [\exp(i\mathbf{k}_l \rho) + \exp(-i\mathbf{k}_l \rho)], \end{aligned} \quad (4.119)$$

где

$$\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'. \quad (4.120)$$

Теперь можно выполнить суммирование по поляризацонному индексу σ . Как мы знаем, векторы \mathbf{k}_l , \mathbf{e}_{l1} и \mathbf{e}_{l2} составляют тройку взаимно перпендикулярных единичных векторов. Величина $(\mathbf{e}_{l1})_i$ есть i -я компонента вектора \mathbf{e}_{l1} в декартовой системе координат, т. е. просто направляющий косинус этого вектора, или косинус угла между вектором \mathbf{e}_{l1} и осью x_i . Аналогично этому, величины $(\mathbf{e}_{l2})_j$ и $(\mathbf{k}_l)_i$ равны косинусам углов, которые эти векторы образуют с осью x_i . Как известно, направляющие косинусы связаны соотношением

$$(\mathbf{e}_{l1})_i (\mathbf{e}_{l1})_j + (\mathbf{e}_{l2})_i (\mathbf{e}_{l2})_j + (\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j = \delta_{ij},$$

или

$$\sum_{\sigma=1}^2 (\mathbf{e}_{l\sigma})_i (\mathbf{e}_{l\sigma})_j = \delta_{ij} - (\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j \equiv \delta_{ij} - \frac{(\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j}{k_l^2}. \quad (4.121)$$

Подставляя это соотношение в коммутатор (4.119), получим коммутационное соотношение между полями в полости в один и тот же момент времени:

$$[A_i(\mathbf{r}), D_j(\mathbf{r}')] = -\frac{i\hbar}{\tau} \sum_l [\delta_{ij} - (\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j] e^{i\mathbf{k}_l \rho}. \quad (4.122)$$

В силу того, что $\mathbf{k}_{-l} = -\mathbf{k}_{+l}$ и сумма берется по всем целым положительным и отрицательным l , $\exp(-i\mathbf{k}_l \rho)$ и $\exp(+i\mathbf{k}_l \rho)$ удалось объединить в одну экспоненту.

Таким образом, коммутационное соотношение между полями $A_i(\mathbf{r})$ и $D_j(\mathbf{r}')$ в полости выглядит несколько необычно. Для того чтобы перейти к свободному пространству, необходимо объем полости устремить к бесконечности ($L^3 = \tau \rightarrow \infty$). При этом согласно условию (4.110) суммы в правой части выражения (4.122) следует заменить интегралами. В результате для свободного пространства получим

$$[A_i(\mathbf{r}), D_j(\mathbf{r}')] = -i\hbar \delta_{ij}^T(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.123)$$

где

$$\delta_{ij}^T(\rho) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}\rho) (\delta_{ij} - k_i k_j) \quad (4.124)$$

и $d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$ — элементарный объем в \mathbf{k} -пространстве. Введенная согласно равенству (4.124) функция δ_{ij}^T называется поперечной δ -функцией и не является обычной дираковой δ -функцией, для которой имеет место соотношение

$$\delta(\rho) = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}\rho) \equiv \delta(\rho_x) \delta(\rho_y) \delta(\rho_z). \quad (4.125)$$

В приложении В будет выведено несколько полезных соотношений для поперечной δ -функции. В частности, там будет показано (см. (В.6)), что

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial \delta_{ij}^T(\rho)}{\partial x_i} = 0, \quad (4.126)$$

где $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и x_1, x_2, x_3 — компоненты \mathbf{r} .

Беря дивергенцию от обеих частей равенства (4.123) с учетом соотношения (4.126), мы получим

$$\left[\sum_{i=1}^3 \frac{\partial A_i(\mathbf{r})}{\partial x_i}, D_j(\mathbf{r}') \right] = -i\hbar \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \delta_{ij}^T}{\partial x_i} = 0. \quad (4.127)$$

Так как $D_j(r') \neq 0$, то

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial A_i}{\partial x_i} = 0.$$

Это соотношение соответствует условию кулоновской калибровки. Поэтому соотношение (4.123) справедливо только при такой калибровке электромагнитного поля.

Так как коммутационные соотношения одинаковы в гейзенберговском и шредингеровском представлениях, то согласно (4.123) мы можем записать равенство

$$[A_i^{\text{H}}(r, t), D_j^{\text{H}}(r', t)] = -i\hbar \delta_{ij}^{\text{T}}(r - r'), \quad (4.128)$$

где t — один и тот же момент времени для A_i и D_j .

Следует еще раз подчеркнуть, что хотя коммутационные соотношения между A_i и D_j необходимы в теории, величина A_i не является физически наблюдаемой величиной ни в классической, ни в квантовой теории.

Покажем теперь, что

$$[A_i(r, t), A_j(r', t)] = 0. \quad (4.129)$$

Для этого используем шредингеровское представление оператора. Согласно выражению (4.118а) и коммутационным соотношениям (4.95) и (4.96) имеем

$$\begin{aligned} [A_i(r), A_j(r')] &= \\ &= \sum_{l, \sigma} \frac{\hbar}{2\omega_l \varepsilon_0 \tau} (\mathbf{e}_{l\sigma})_i (\mathbf{e}_{l\sigma})_j [\exp(i\mathbf{k}_l \rho) - \exp(-i\mathbf{k}_l \rho)], \end{aligned}$$

где $\rho = r - r'$. Для суммирования по индексу σ используем соотношение (4.121). Тогда получим следующее коммутационное соотношение:

$$[A_i(r), A_j(r')] = i\hbar \sum_l \frac{1}{\omega_l \varepsilon_0 \tau} [\delta_{ij} - (\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j] \sin(\mathbf{k}_l \rho). \quad (4.130)$$

Так как $\omega_l = c |\mathbf{k}_l|$ и $\mathbf{k}_{-l} = -\mathbf{k}_l$, то функция $\omega_l^{-1} [\delta_{ij} - (\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j]$ — четная относительно замены $(-l)$ на l , а функция $\sin(\mathbf{k}_l \rho)$ — нечетная. Поэтому вся сумма в соотношении (4.130) обращается в нуль. Следовательно, соотношение (4.129) оказывается справедливым как в шредингеровском, так и в гейзенберговском представлениях.

Коммутационные соотношения для операторов D и B , относящиеся к одному моменту времени. Величины D и B (или E и H) являются физически наблюдаемыми величинами. Поэтому очень важно знать коммутационные соотношения между их значениями в один и тот же момент времени. Так же, как мы доказывали справедливость равенства (4.129), легко показать, что

$$[D_i(\mathbf{r}, t), D_j(\mathbf{r}', t)] = 0, \quad (4.131a)$$

$$[B_i(\mathbf{r}, t), B_j(\mathbf{r}', t)] = 0, \quad (4.131b)$$

где компоненты B_i в шредингеровском представлении определяются из соотношения

$$\begin{aligned} B_S(\mathbf{r}, 0) = & -i \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar \omega_l \mu_0}{2\tau}} |\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l| \times \\ & \times [a_{l\sigma} \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) - a_{l\sigma}^\dagger \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (4.132)$$

Для доказательства условия (4.131b) необходимо доказать соотношение

$$\sum_{\sigma} |\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l|_i |\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l|_j = \sum_{\sigma} (e_{l\sigma})_i (e_{l\sigma})_j, \quad (4.133)$$

которое является следствием условия (4.124). Это легко показать, если предположить, что векторы \mathbf{e}_{l1} , \mathbf{e}_{l2} и \mathbf{k}_l образуют правую тройку. Тогда

$$(\mathbf{e}_{l\sigma}, \mathbf{e}_{l\sigma'}) = \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \sigma, \sigma' = 1, 2,$$

$$(\mathbf{e}_{l\sigma}, \mathbf{k}_l) = 0, \quad (4.134)$$

$$[\mathbf{e}_{l1} \mathbf{e}_{l2}] = \mathbf{k}_l.$$

Отсюда следует, что $[\mathbf{e}_{l1}, \mathbf{k}_l] = -\mathbf{e}_{l2}$ и $[\mathbf{e}_{l2}, \mathbf{k}_l] = \mathbf{e}_{l1}$, и доказательство (4.133) очевидно.

Согласно общей теории раздела 1.13 соотношения (4.131) означают, что любые две компоненты вектора D (или E) могут быть одновременно измерены без какой-либо взаимной интерференции. То же самое относится к любым двум компонентам вектора B (или H).

В Приложении Г будут выведены следующие коммутационные соотношения:

$$[D_i(r, t), B_i(r', t)] = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (4.135)$$

$$[D_i(r, t), B_j(r', t)] = \begin{cases} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(r), & (4.136a) \\ +i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \delta(r), & (4.136b) \end{cases}$$

где соотношение (4.136a) справедливо, если индексы i , j и k получены циклической перестановкой индексов 1, 2, 3; если индексы i , j , k образованы циклической перестановкой индексов 1, 3, 2, то справедливо соотношение (4.136b).

Из соотношения (4.135) следует, что параллельные компоненты векторов \mathbf{D} и \mathbf{B} могут быть одновременно измерены, в то время как согласно соотношениям (4.136) взаимно перпендикулярные компоненты этих векторов не могут быть одновременно измерены.

Гейзенберговские уравнения движения для векторов \mathbf{D} и \mathbf{B} . Так как векторы \mathbf{D} , \mathbf{B} , \mathbf{E} и \mathbf{H} являются операторами, то они удовлетворяют гейзенберговским уравнениям движения. Гамильтониан электромагнитного поля может быть записан в виде

$$H = \frac{1}{2} \int \left[\frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{D}^2(r', t) + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2(r', t) \right] d\tau'. \quad (4.137)$$

Этот гамильтониан представляет собой в данном случае эрмитов оператор в гейзенберговском представлении. В Приложении Д будет показано, что

$$i\hbar \frac{d\mathbf{D}_H}{dt} = [\mathbf{D}_H, H] = i\hbar \text{rot } \mathbf{H}_H, \quad (4.138a)$$

$$i\hbar \frac{d\mathbf{B}_H}{dt} = [\mathbf{B}_H, H] = -i\hbar \text{rot } \mathbf{E}_H. \quad (4.138b)$$

Это и есть гейзенберговские уравнения движения для операторов \mathbf{D} , \mathbf{B} , \mathbf{H} , \mathbf{E} в гейзенберговском представлении. Однако по форме эти уравнения идентичны классическим уравнениям движения Максвелла. Таким образом, мы построили самосогласованную квантовую теорию, которая

переходит в классическую при $\hbar \rightarrow 0$. Согласно соотношениям (4.136) при $\hbar \rightarrow 0$ операторы коммутируют между собой и ведут себя подобно классическим переменным.

Два других уравнения Максвелла также оказываются справедливыми. Действительно, так как $(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l) = 0$, то из выражения (4.118b) следует, что $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$; аналогично, так как $([\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] \mathbf{k}_l) = 0$, то из выражения (4.132) следует, что $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$.

4.8. Нулевые флуктуации поля

В разделе 4.2 мы рассматривали нулевую энергию и нулевые флуктуации в LC -контуре. В настоящем разделе мы рассмотрим нулевые флуктуации электромагнитных полей в полости.

Согласно (4.118b) для j -й компоненты вектора электрической индукции $D_j(\mathbf{r}, t)$ в гейзенберговском представлении можно написать следующее выражение:

$$D_j(\mathbf{r}, t) = D_j^{(+)}(\mathbf{r}, t) + D_j^{(-)}(\mathbf{r}, t), \quad (4.139)$$

где

$$D_j^{(+)}(\mathbf{r}, t) = i \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \hbar \omega_l}{2\pi}} (\mathbf{e}_{l\sigma})_j a_{l\sigma}(t) e^{i\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{r}},$$

$$D_j^{(-)}(\mathbf{r}, t) = (D_j^{(+)}(\mathbf{r}, t))^{\dagger}. \quad (4.140)$$

Выражение для компоненты $D_j^{(+)}$ содержит только операторы уничтожения $a_{l\sigma}$, а сопряженное ему выражение $D_j^{(-)}$ содержит только операторы рождения $a_{l\sigma}^{\dagger}$.

Среднее значение компоненты D_j определяется, как известно, выражением вида

$$\langle D_j \rangle = \langle \psi(0) | D_j(\mathbf{r}, t) | \psi(0) \rangle, \quad (4.141)$$

где $|\psi(0)\rangle$ — состояние поля в момент $t = 0$.

Согласно выражению (4.104) произвольное состояние поля $|\psi(0)\rangle$ может быть разложено по полной системе собственных кет-векторов оператора энергии (или оператора числа фотонов). Для простоты будем считать, что поле в начальный момент $t = 0$ представляет собой чистое собственное состояние оператора энергии, в котором имеется $n_{l\sigma}$ квантов, соответствующих типу колебаний

($l\sigma$), т. е.

$$|\psi(0)\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle, \quad (4.142)$$

где мы сократили набор индексов (σl) до l , так что типы колебаний различаются индексами $1, 2, \dots, \infty$. Используя соотношение (4.100) и соотношения ортонормированности (4.106), нетрудно показать, что среднее значение оператора D_j в состоянии (4.142) равно нулю:

$$\langle D_j \rangle = 0. \quad (4.143)$$

Аналогично можно доказать, что в том же самом состоянии (4.142)

$$\langle B_j \rangle = 0. \quad (4.144)$$

Эти результаты соответствуют классическому утверждению о том, что для гармонических колебаний средние по времени значения величин $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ равны нулю.

Теперь мы вычислим ожидаемое значение величины D_j^2 в состоянии $|\psi(0)\rangle$. Согласно соотношению (4.139) имеем

$$D_j^2 = D_j^{(+2)} + D_j^{(-2)} + D_j^{(-)}D_j^{(+)} + D_j^{(+)}D_j^{(-)}. \quad (4.145)$$

После несложных алгебраических преобразований с использованием соотношений (4.100), (4.106), (4.95), (4.96) и (4.140) мы получим, что

$$\langle D_j^2(\mathbf{r}, t) \rangle = \sum_{l, \sigma} \frac{\varepsilon_0 \hbar \omega_l}{\tau} (e_{l\sigma})_j^2 \left(n_{l\sigma} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.146)$$

Так как, кроме того,

$$\mathbf{D}^2 = \sum_{j=1}^3 D_j^2, \quad (4.147)$$

то

$$\langle \mathbf{D}^2 \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{l, \sigma} \varepsilon_0 \hbar \omega_l \left(n_{l\sigma} + \frac{1}{2} \right) \sum_{j=1}^3 (e_{l\sigma})_j^2. \quad (4.148)$$

Величины $(e_{l\sigma})_j$ являются направляющими косинусами вектора $e_{l\sigma}$ в декартовой системе координат. Поэтому $\sum (e_{l\sigma})_j^2 = 1$. Отсюда среднее значение квадрата поля \mathbf{D}^2

равно

$$\langle \mathbf{D}^2 \rangle = \frac{\varepsilon_0}{\tau} \sum_{l, \sigma} \hbar \omega_l \left(n_{l\sigma} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.149)$$

Если $n_{l\sigma} = 0$ (вакуумное состояние), то

$$\langle \mathbf{D}^2 \rangle = \frac{\varepsilon_0}{\tau} \sum_{l, \sigma} \frac{\hbar \omega_l}{2}. \quad (4.150)$$

Это состояние электромагнитного поля называется состоянием с нулевыми флуктуациями поля. Каждый тип колебаний поля в этом состоянии дает в выражение (4.150) вклад, равный $\hbar \omega_l / 2$. Так как число типов колебаний поля в полости бесконечно, то энергия нулевых флуктуаций поля также бесконечна.

Эта бесконечность оказывается несущественной, ибо мы не указали способа, с помощью которого следует измерять поле в данном состоянии. По терминологии радиоинженеров полоса пропускания любого измерительного инструмента конечна, и поэтому он не зафиксирует бесконечно больших нулевых флуктуаций поля. В частности, в качестве измерительного инструмента можно взять электрический заряд, взаимодействующий с полем. Этот заряд займет в пространстве некоторый объем ΔV . Для того чтобы поле оказало на заряд некоторое измеримое действие, потребуется время Δt . Отсюда следует, что физический смысл имеют средние по пространству и времени значения величин

$$\overline{D_j(\Delta V, \Delta t)} \equiv \frac{1}{\Delta V \Delta t} \int_{\Delta V} d\tau \int_{\Delta t} dt D_j^H(r, t). \quad (4.151)$$

Отсюда среднее значение $\overline{D_j^2}$ в состоянии вакуума равно

$$\begin{aligned} \langle 0 | \overline{[D_j(\Delta V, \Delta t)]^2} | 0 \rangle &= \\ &= \frac{1}{(\Delta V)^2 (\Delta t)^2} \int_{\Delta V} d\tau d\tau' \int_{\Delta t} dt dt' \langle 0 | D_j(r, t) D_j(r', t') | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.152)$$

Согласно разложению (4.140) мы имеем

$$\begin{aligned} \langle 0 | D_j(r, t) D_j(r', t') | 0 \rangle &= \\ &= \sum_{l, \sigma} \frac{\varepsilon_0 \hbar \omega_l}{2\tau} (e_{l\sigma})_j^2 \exp \{ i [\mathbf{k}_l \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \omega_l (t - t')] \}. \end{aligned} \quad (4.153)$$

Суммируя выражение (4.152) по j , чтобы получить полное поле, и учитывая, что $\sum_{j=1}^3 (\mathbf{e}_{lj})_j^2 = 1$, получим

$$\langle 0 | \sum_{j=1}^3 \overline{[D_j(\Delta V, \Delta t)]^2} | 0 \rangle = \frac{\varepsilon_0 \hbar}{2(\Delta V)^2 (\Delta t)^2} \times \\ \times \int d\tau d\tau' dt dt' \sum_l \frac{\omega_l}{\tau} \exp \{i [k \cdot \rho - \omega_l (t - t')]\}, \quad (4.154)$$

где $\rho = r - r'$. Выполняя интегрирование по dt и dt' и заменяя суммирование по l интегрированием по k с помощью соотношения (4.110), получаем

$$\langle 0 | \sum_{j=1}^3 \overline{[D_j(\Delta V, \Delta t)]^2} | 0 \rangle = \frac{\hbar \varepsilon_0}{16\pi^3 (\Delta V)^2 (\Delta t)^2 c} \times \\ \times \iiint \frac{dk d\tau d\tau'}{k} \exp(ik\rho) 4 \sin^2 \left(\frac{ck}{2} \Delta t \right), \quad (4.155)$$

где $\omega_l \rightarrow c |k| \equiv ck$. Пока Δt и ΔV конечны, среднее значение квадрата поля в измеряемой области остается конечным. Только при $\Delta V \rightarrow 0$ и $\Delta t \rightarrow 0$ это среднее значение становится бесконечным. При измерении такое ограничение конечными объемами и конечными интервалами времени соответствует ограничению определенной частотной полосой пропускания измерительных инструментов.

Следует отметить, что нулевые флуктуации поля могут давать измеримый эффект, например, в квантовой механике. В частности, они ответственны за лэмбовское смещение $2P_{1/2} - 2S_{1/2}$ уровней водородного атома, где нулевые флуктуации поля взаимодействуют с электроном. Образно говоря, они «индуцируют» спонтанное излучение электрона при переходе из состояния $2P_{1/2}$ в состояние $2S_{1/2}$. Кроме того, нулевые флуктуации вызывают спонтанное излучение в мазерах, параметрических усилителях, аттенюаторах и т. п. В свою очередь это спонтанное излучение и является источником квантовых шумов. Можно также сказать, что нулевые флуктуации ответственны и за естественную ширину линий излучения атомов. Ниже, после изучения взаимодействия электромагнитного поля с веществом, мы более подробно обсудим все эти вопросы.

4.9. Классическое поле излучения при наличии источников

Рассмотрим теперь электромагнитное поле, взаимодействующее с заданным распределением зарядов и токов. Это будет полевым обобщением квантовой теории LC -контура с подключенным к нему генератором напряжения. В квантовой электронике интереснее рассматривать поля с помощью некоторых эмпирических моделей, чем рассматривать фундаментальные понятия поля. В этом и следующем разделах мы приведем один из способов рассмотрения задач квантования полей.

Уравнения Максвелла с источниками в системе единиц МКС имеют вид

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (4.156)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (4.157)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho, \quad (4.158)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (4.159)$$

где

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E}. \quad (4.160)$$

Заряды и токи должны удовлетворять уравнению непрерывности

$$\operatorname{div} \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (4.161)$$

где \mathbf{J} и ρ — функции \mathbf{r} и t . Уравнение непрерывности легко получить из уравнений Максвелла, если взять дивергенцию от обеих частей соотношения (4.159) и в полученное равенство подставить (4.158). Как и при отсутствии источников, уравнения (4.156) и (4.157) обращаются в тождества, если ввести векторный \mathbf{A} и скалярный V потенциалы по формулам

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (4.162a)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \operatorname{grad} V. \quad (4.162b)$$

В силу градиентной инвариантности уравнений Максвелла мы примем кулоновскую калибровку потенциалов

поля:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (4.163)$$

Эту калибровку мы использовали и для поля в отсутствие источников. Однако теперь, когда ρ и \mathbf{J} не равны нулю, мы уже не можем считать, что скалярный потенциал $V = 0$.

Если соотношения (4.162a) и (4.162b) подставить в уравнение (4.159) и воспользоваться равенством (4.163), то мы получим вместо волнового уравнения (4.56) уравнение вида

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \mathbf{J} + \nabla \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial V}{\partial t} \right). \quad (4.164)$$

Если подставить (4.162b) в уравнение (4.158) и воспользоваться соотношениями (4.160) и (4.163), то для потенциала V получим уравнение Пуассона

$$\nabla^2 V = -\rho / \epsilon_0. \quad (4.165)$$

Мы считаем ρ и \mathbf{J} заданными функциями координат и времени. Тогда потенциал V определяется хорошо известным соотношением

$$V(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau', \quad (4.166)$$

где $d\tau' = dx' dy' dz'$.

Из векторного анализа известно, что любой вектор \mathbf{A} может быть разложен на две компоненты:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^T + \mathbf{A}^L. \quad (4.167)$$

Мы назовем их соответственно поперечной и продольной компонентами, так что

$$\operatorname{div} \mathbf{A}^T = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{A}^L = 0. \quad (4.168)$$

Поскольку $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, то согласно выражениям (4.167) и (4.168) мы имеем, что

$$\operatorname{div} \mathbf{A}^L = 0. \quad (4.169)$$

Если для произвольного вектора \mathbf{C} одновременно $\operatorname{div} \mathbf{C} = 0$ и $\operatorname{rot} \mathbf{C} = 0$, то можно считать $\mathbf{C} = 0$. Поэтому при

кулоновской калибровке

$$A^L = 0 \quad (4.170)$$

и векторный потенциал A является чисто поперечным.

На такие же компоненты можно разложить плотность тока

$$J = J^T + J^L, \quad (4.171)$$

где

$$\operatorname{div} J^T = 0, \quad (4.172a)$$

$$\operatorname{rot} J^L = 0. \quad (4.172b)$$

Тогда из уравнения непрерывности (4.161) следует, что

$$\operatorname{div} J^L = -\frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad (4.173)$$

т. е. производная $\partial \rho / \partial t$ вызывает только продольные токи.

Соотношение (4.172b) будет выполнено тождественно, если положить

$$J^L = \nabla \psi, \quad (4.174)$$

где ψ — произвольная скалярная функция, ибо $\operatorname{rot} \operatorname{grad} \psi \equiv 0$. Подставляя (4.174) в (4.173), мы получим

$$\nabla^2 \psi = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (4.175)$$

Это уравнение Пуассона, решение которого в каждый данный момент времени имеет вид

$$\psi = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{\rho(r', t)}{|r - r'|} d\tau'. \quad (4.176)$$

Согласно (4.175) и (4.167) мы имеем

$$J^L = \varepsilon_0 \nabla \frac{\partial V}{\partial t}. \quad (4.177)$$

Если соотношения (4.167) и (4.171) подставить в (4.164) и воспользоваться (4.177), то получим уравнение

$$\nabla^2 A^T - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A^T}{\partial t^2} = -\mu_0 J^T, \quad (4.178)$$

которому должен удовлетворять вектор \mathbf{A}^T , если потенциал задан соотношением (4.166). Таким образом, при кулоновской калибровке потенциалов классические поля должны удовлетворять уравнениям (4.165) и (4.178).

4.10. Квантование поля при наличии источников

Для того чтобы проквантовать поле, мы должны подобрать такой гамильтониан, который сводил бы гейзенберговские уравнения движения для переменных поля, рассматриваемых как операторы, к уравнениям Максвелла. В общем случае гамильтониан не обязательно должен совпадать с оператором энергии. При исследовании эмпирических моделей для нахождения гамильтониана можно воспользоваться методом «проб и ошибок». При этом гамильтониан должен быть таким, чтобы для систем, имеющих классический аналог, гейзенберговские уравнения движения имели такой вид, как классические уравнения движения.

Так как потенциал V определяется заданным распределением зарядов (4.166), то его нельзя рассматривать как независимую переменную поля. Поэтому в квантовой теории V не является оператором поля. Операторами в квантовой теории будут векторный потенциал \mathbf{A} , а также векторы \mathbf{B} , \mathbf{H} , \mathbf{D} , \mathbf{E} .

Выберем гамильтониан в следующем виде:

$$H = \frac{1}{2} \int \left[\varepsilon_0 \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{\mu_0} (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] d\tau - \int (\mathbf{J}, \mathbf{A}) d\tau + \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}, t)\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau'. \quad (4.179)$$

Критерием справедливости этого гамильтониана будет правильность уравнений движения, выведенных из него. Дополнительным соображением в пользу такого вида гамильтониана может служить тот факт, что первый член этого гамильтониана представляет энергию поля в отсутствие токов и зарядов, второй член — энергию взаимодействия поля с токами, а третий член — энергию кулоновского взаимодействия зарядов между собой.

Опираясь на результаты, полученные для полей без источников (раздел 4.7), мы постулируем следующие коммутационные соотношения в шредингеровском

представлении:

$$\begin{aligned} [A_k(\mathbf{r}), D_l(\mathbf{r}')] &= -i\hbar\delta_{kl}^T(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ [A_k(\mathbf{r}), A_l(\mathbf{r}')] &= [D_k(\mathbf{r}), D_l(\mathbf{r}')] = 0, \end{aligned} \quad (4.180)$$

где δ^T — поперечная δ -функция.

Мы должны теперь показать, что эти коммутационные соотношения вместе с гамильтонианом (4.179) приводят к правильным уравнениям движения.

Как известно, векторы \mathbf{D} и \mathbf{A} связаны соотношением

$$\varepsilon_0^{-1}\mathbf{D} = -\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad } V. \quad (4.181)$$

Так как потенциал V является в нашей картине c -числом, то c -числом будет и функция $\text{grad } V$, а поэтому

$$\begin{aligned} [A_k(\mathbf{r}), D_l(\mathbf{r}')] &= -\varepsilon_0 \left[A_k(\mathbf{r}), \dot{A}_l(\mathbf{r}') + \frac{\partial V(\mathbf{r}', t)}{\partial x'_l} \right] = \\ &= -\varepsilon_0 [A_k(\mathbf{r}), \dot{A}_l(\mathbf{r}')] = -i\hbar\delta_{kl}^T(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (4.182)$$

Так как $\text{grad } V$ есть c -число, то коммутационные соотношения для поля без источников совпадают с коммутационными соотношениями для поля с источниками. Поэтому при наличии источников мы можем пользоваться выведенными ранее разложениями для операторов \mathbf{A} и $\dot{\mathbf{A}}$ в шредингеровском представлении для случая, когда источники поля отсутствовали. Таким образом, согласно (4.118а) мы имеем

$$\mathbf{A}_S(\mathbf{r}, 0) = \sum_{l,\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l\varepsilon_0\tau}} \mathbf{e}_{l\sigma} [a_{l\sigma} e^{i\mathbf{k}_l\mathbf{r}} + a_{l\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}_l\mathbf{r}}]. \quad (4.183)$$

Производная $\dot{\mathbf{A}}_S(\mathbf{r}, 0)$ равна $-\mathbf{D}_S(\mathbf{r}, 0)/\varepsilon_0$, т. е.

$$\dot{\mathbf{A}}_S(\mathbf{r}, 0) = -i \sum_{l,\sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_l}{2\varepsilon_0\tau}} \mathbf{e}_{l\sigma} [a_{l\sigma} e^{i\mathbf{k}_l\mathbf{r}} - a_{l\sigma}^+ e^{-i\mathbf{k}_l\mathbf{r}}] \quad (4.184)$$

(см. (4.118b)). При наличии источников величина \mathbf{D} определяется соотношением (4.181), а величина $\dot{\mathbf{A}}_S$ — по-прежнему соотношением (4.184).

Так как коммутационные соотношения одинаковы в гейзенберговском и шредингеровском представлениях, то легко вывести гейзенберговские уравнения движения для оператора $A(\mathbf{r}, t)$. Для $A_k(\mathbf{r}, t)$ имеем

$$i\hbar \frac{dA_k}{dt} = [A_k, H]. \quad (4.185)$$

В гамильтониане (4.179) все компоненты A коммутируют с кулоновским членом, так как ρ является c -числом. Аналогично, так как \mathbf{J} также есть c -число, то все компоненты A коммутируют с членом, представляющим взаимодействие поля с током в гамильтониане (4.179). Так как компоненты A коммутируют с пространственными производными $\text{rot } A$, то они коммутируют с членом $(\text{rot } A)^2$ в (4.179). Итак, они не коммутируют лишь с членом, пропорциональным $(\dot{A})^2$ в (4.179). В приложении E будет показано, что

$$i\hbar \dot{A}_k = \left[A_k, \int \frac{\varepsilon_0}{2} (\dot{A})^2 d\tau \right] = i\hbar \dot{A}_k^T. \quad (4.186)$$

Отсюда можно заключить, что продольная компонента $A^L = 0$, а поперечная компонента A^T тождественно удовлетворяет соотношению (4.186). Такой вывод вполне соответствует классическому результату (4.170).

Остальные гейзенберговские уравнения движения можно написать в виде

$$i\hbar \frac{d\dot{A}_k}{dt} = [\dot{A}_k, H]. \quad (4.187)$$

Легко видеть, что \dot{A}_k коммутируют со всеми членами гамильтониана (4.179), за исключением двух слагаемых, которые пропорциональны $\text{rot } A$ и (\mathbf{J}, A) . В качестве упражнения предлагаем показать, что

$$\left[\dot{A}_k(\mathbf{r}), \int \frac{d\tau'}{2\mu_0} [\text{rot}' A(\mathbf{r}')]^2 \right] = i\hbar c^2 \nabla^2 A_k^T(\mathbf{r}), \quad (4.188)$$

$$\left[\dot{A}_k(\mathbf{r}), \int (\mathbf{J}(\mathbf{r}'), A(\mathbf{r}')) d\tau' \right] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0} J_k^T(\mathbf{r}). \quad (4.189)$$

Во всех этих соотношениях подразумевается, что все величины рассматриваются в один и тот же момент времени. Подставляя соотношения (4.188) и (4.189) в уравнение

(4.187), мы получим правильное уравнение для поля в виде (4.178). Тем самым доказана правильность выбора гамильтониана (4.179).

Если разложения полей (4.183) и (4.184) подставить в гамильтониан (4.179), то он примет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{l, \sigma} \hbar \omega_l a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \iint \frac{\rho(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau d\tau' - \\
 & - \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0}} [a_{l\sigma} \int (\mathbf{e}_{l\sigma}, \mathbf{J}(\mathbf{r})) e^{i\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{r}} d\tau + \\
 & + a_{l\sigma}^+ \int (\mathbf{e}_{l\sigma}, \mathbf{J}(\mathbf{r})) e^{-i\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{r}} d\tau]. \quad (4.190)
 \end{aligned}$$

Первый член есть уже знакомая нам энергия поля, свободного от источников. Второй член дает энергию кулоновского взаимодействия. Последние два слагаемых дают энергию взаимодействия поля с током. Гамильтониан (4.190) зависит от времени через ρ и \mathbf{J} , которые явно зависят от времени. Операторы же $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^+$ в шредингеровском представлении от времени не зависят.

ЗАДАЧИ

4.1. Покажите, что при кулоновской калибровке и в отсутствие источников поля определяются исключительно векторным потенциалом.

4.2. Используя (4.60) и (4.62), покажите, что нормальные типы колебаний в полости ортогональны. Обсудите случай вырождения собственных колебаний.

4.3. Проверьте соотношение (4.138b).

4.4. Вычислите коммутатор

$$[D_x(\mathbf{r}, t), B_y(\mathbf{r}', t')], \text{ где } t \neq t'.$$

4.5. Докажите соотношения (4.18).

4.6. Вычислите коммутатор $[V_{\mathbf{H}}(z', t), \partial I_{\mathbf{H}}(z', t)/\partial z']$, где $V_{\mathbf{H}}$ и $I_{\mathbf{H}}$ определяются соотношением (4.41).

4.7. Используя обозначения (4.139) и (4.140), найдите $N\{D^2\}$, где N есть нормально-упорядочивающий оператор. Найдите $\langle 0 | N\{D^2\} | 0 \rangle$, где $| 0 \rangle$ — вакуумное состояние поля. Полученный результат сравните с (4.150).

4.8. Выведите коммутационные соотношения (4.188) и (4.189).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

5.1. Введение

В дираковской теории излучения атом и взаимодействующее с ним поле рассматриваются как единая система, энергия которой состоит из трех частей: 1) энергия атома, 2) энергия поля излучения и 3) небольшая энергия взаимодействия между атомом и полем.

Если атом и поле излучения взаимодействуют друг с другом, то, очевидно, необходимо учитывать энергию этого взаимодействия. Это взаимодействие можно проиллюстрировать на очень простой модели, предложенной Ферми [24]. Рассмотрим маятник с резонансной частотой ω_0 , соответствующий атому, и струну, колеблющуюся с частотой ω_1 , соответствующую полю излучения. Когда они не связаны между собой, то они колеблются независимо, и полная энергия такой системы равна сумме энергий маятника и струны. Если маятник и струну соединить упругой невесомой нитью, то энергия будет передаваться от одной части системы к другой. Пусть в момент $t = 0$ струна колеблется, а маятник покоится. Тогда через время t часть энергии колебаний струны будет передана маятнику. Если частоты ω_0 и ω_1 совпадают, то будет иметь место полный обмен энергией. Это соответствует поглощению излучения атомом.

В обратном случае, когда первоначально возбужден маятник, а струна покоится и частоты их совпадают, передача энергии струне соответствует излучению энергии атомом.

В разделе 5.2 мы приведем нерелятивистский гамильтониан одноэлектронного атома в присутствии поля излучения. В этом случае невозможно точное решение уравнения Шредингера, и поэтому для получения приближен-

ного решения следует обратиться к теории возмущений, зависящих от времени. Эта теория рассмотрена в разделе 5.3. В разделах 5.4 и 5.5 мы рассмотрим теорию поглощения и испускания излучения атомом в том случае, когда поле излучения оказывается квантованным. При этом в теорию автоматически оказывается включенным спонтанное излучение атома, находящегося в возбужденном состоянии. В то же время без квантования поля объяснить появление спонтанного излучения весьма затруднительно.

Спонтанное излучение действует подобно затуханию в колебательной системе, и оно же дает возможность объяснить естественную ширину спектральных линий атомов. В разделе 5.6 эта теория будет применена к простому случаю двухуровневого атома. Спонтанное излучение, являющееся источником квантовых шумов, будет обсуждаться также в гл. VII.

Эффект Доплера, состоящий в изменении частоты света, излучаемого движущимся источником, очень просто объясняется волновой теорией света. В разделе 5.7 мы покажем, что в квантовой теории эффект Доплера объясняется на основе законов сохранения энергии и импульса системы атом — фотон. В разделе 5.8 мы дадим квантовое объяснение такого типично волнового явления, как распространение света в вакууме.

В разделе 5.9 мы рассмотрим полуклассическую теорию экспериментов по спиновому резонансу в двухуровневой системе. В разделе 5.10 будет рассмотрено влияние соударений на ширину резонансной линии. В последнем разделе мы снова вернемся к экспериментам по резонансу в спиновой системе и учтем квантовую структуру поля. Такая формулировка явится в дальнейшем основой простой модели мазера, которую мы будем использовать в гл. VII при обсуждении квантовых шумов в мазерном усилителе.

5.2. Гамильтониан атома в поле излучения

Согласно Дираку, атом и взаимодействующее с ним поле рассматриваются как единая система. Для простоты считается, что атом имеет один электрон с зарядом e и массой m . Потенциал поля ядра равен $V(r)$, где r — ра-

диус-вектор электрона. Импульс электрона равен \mathbf{p} . Энергией спина мы пренебрегаем и, кроме того, будем считать энергию электрона достаточно малой для того, чтобы не учитывать релятивистские поправки.

При кулоновской градиентной инвариантности ($\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$) поле излучения можно описывать только векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Для простоты мы не будем рассматривать источники поля излучения (заряды и токи).

Нерелятивистский гамильтониан атома в поле излучения в системе единиц МКС имеет вид (сравните с (2.19))

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + eV(\mathbf{r}) + H_r, \quad (5.1)$$

где H_r — энергия поля излучения в отсутствие атома.

Так как $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$, то выражение (5.1) можно записать в виде

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + eV(\mathbf{r}) + H_r - \frac{e}{m} (\mathbf{A}, \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2. \quad (5.2)$$

Первые два члена этого выражения соответствуют энергии свободного атома:

$$H_a = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + eV(\mathbf{r}). \quad (5.3)$$

Член H_r дает энергию свободного от источников квантованного поля излучения в отсутствие атома:

$$H_r = \sum_{l,\sigma} \hbar \omega_l \left(a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} + \frac{1}{2} \right). \quad (5.4)$$

Она известна из гл. IV. Оба гамильтониана мы объединим в один гамильтониан H_0 вида

$$H_0 = H_a + H_r, \quad (5.5)$$

который будем рассматривать как гамильтониан невозмущенной системы.

Член первого порядка по константе взаимодействия e в гамильтониане (5.2) обозначим

$$H_1 = -\frac{e}{m} (\mathbf{A}, \mathbf{p}). \quad (5.6)$$

Этот член мал по сравнению с H_a и H_r и описывает взаимодействие электрона p с полем излучения A .

В тех случаях, которые мы будем обсуждать в дальнейшем, только этот член имеет значение, он велик по сравнению с последним членом второго порядка по e в выражении (5.2):

$$H_2 = \frac{e^2}{2m} A^2. \quad (5.7)$$

Этот последний член представляет энергию взаимодействия различных осцилляторов поля излучения друг с другом через их взаимодействие с электроном.

Поскольку гамильтониан H в (5.2) задан в шредингеровском представлении, то в членах H_1 и H_2 мы также должны использовать разложение векторного потенциала (4.118а) в шредингеровском представлении, т. е.

$$A(r) = \sum_{l,\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} e_{l\sigma} [a_{l\sigma} \exp(ik_l r) + a_{l\sigma}^\dagger \exp(-ik_l r)]. \quad (5.8)$$

Здесь операторы $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^\dagger$ подчиняются бозонным коммутационным соотношениям, и мы предполагаем, что атом и поле находятся внутри полости с объемом τ .

Таким образом, уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle \quad (5.9)$$

совместно с гамильтонианом H вида (5.2) и векторным потенциалом (5.8) дают полную формулировку нерелятивистской дираковской теории излучения при взаимодействии одноэлектронного атома с квантованным электромагнитным полем. Теперь достаточно только решить уравнение (5.9). Так как точно этого сделать нельзя, то следует воспользоваться теорией возмущений.

5.3. Теория возмущений, зависящих от времени

В этом разделе мы рассмотрим обычную теорию возмущений. В дальнейшем мы будем часто использовать ее.

Запишем гамильтониан системы в виде

$$H = H_0 + H_1, \quad (5.10)$$

где H_1 — малая поправка к H_0 .

Для наших целей членом второго порядка в (5.2) можно пренебречь. Он играет важную роль в теории дисперсии и комптоновского рассеяния. Однако в данной книге мы не будем рассматривать эти эффекты.

Полное уравнение Шредингера с гамильтонианом (5.10) имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = (H_0 + H_1) |\psi(t)\rangle. \quad (5.11)$$

Сначала мы рассмотрим уравнение Шредингера для невозмущенной задачи:

$$i\hbar \frac{\partial |\varphi(t)\rangle}{\partial t} = H_0 |\varphi(t)\rangle. \quad (5.12)$$

Так как по предположению гамильтониан H_0 не зависит от времени, то решение этого уравнения можно записать в виде

$$|\varphi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) |\varphi(0)\rangle. \quad (5.13)$$

Обозначим полную систему ортонормированных векторов состояния невозмущенной системы через $\{|n\rangle\}$, где $|n\rangle$ — собственные векторы оператора H_0 :

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}. \quad (5.14)$$

Числа E_n суть собственные значения оператора H_0 . Начальное состояние $|\varphi(0)\rangle$ можно разложить по полной системе векторов $\{|n\rangle\}$:

$$|\varphi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |n\rangle. \quad (5.15)$$

Согласно формулам (5.14)

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) |n\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |n\rangle.$$

Отсюда и в силу соотношения (5.15) сейчас же следует, что наиболее общее решение уравнения (5.12) имеет вид

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n \tilde{c}_n(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |n\rangle. \quad (5.16)$$

Согласно общей теории гл. I вероятность обнаружить при измерении состояние $|n\rangle$ равна $|c_n(0)|^2 = |\langle n | \varphi(t) \rangle|^2$. Величины $c_n(0)$ называются амплитудами вероятности. Если состояние $|\varphi(t)\rangle$ нормировано на единицу, т. е. $\langle \varphi(t) | \varphi(t) \rangle = 1$, то

$$\sum_n |c_n(0)|^2 = 1, \quad (5.17)$$

ибо система обязательно находится в одном из возможных состояний.

Возвращаясь к уравнению Шредингера вида (5.11), мы можем решение $|\psi(t)\rangle$ разложить по полной системе невозмущенных решений:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) |n\rangle, \quad (5.18)$$

где амплитуда вероятности $c_n(t)$ уже зависит от времени.

Сделаем предварительно два важных замечания.

1. Вектор состояний $|n\rangle$ является собственным вектором оператора H_0 . Это означает, что в системе, описываемой гамильтонианом H_0 , состояние, возникшее в какой-то момент времени, не изменяется до тех пор, пока на него не воздействует какая-либо внешняя сила. Поэтому амплитуда вероятности $c_n(0)$ состояния $|\varphi(t)\rangle$ системы с гамильтонианом H_0 не зависит от времени. Под действием внешней силы, например H_1 , состояние системы H_0 будет изменяться. Внешнее воздействие H_1 вызывает переходы между состояниями невозмущенной системы. В результате этого амплитуды вероятностей состояний оказываются зависящими от времени.

2. Несмотря на то, что разложение (5.18) справедливо при произвольном значении гамильтониана H_1 , оно оказывается весьма неудобным при значениях H_1 , сравнимых с H_0 , ибо в этом случае ряд (5.18) слишком медленно сходится, поэтому его очень трудно использовать на практике.

Теперь определим коэффициенты $c_n(t)$. Для этого подставим разложение (5.18) в уравнение (5.11). Учитывая соотношения (5.14), получим

$$i\hbar \sum_m \frac{\partial c_m}{\partial t} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_m t\right) |m\rangle = \sum_s H_1 |s\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_s t} c_s(t).$$

Умножая обе стороны этого равенства слева на $\langle n |$ и используя ортонормированность состояний, получим, что коэффициенты разложения (5.18) должны удовлетворять системе связанных уравнений

$$i\hbar \frac{\partial c_n}{\partial t} = \sum_s \langle n | H_1 | s \rangle e^{i\omega_{ns}t} c_s(t), \quad (5.19)$$

где

$$\omega_{ns} = \frac{E_n - E_s}{\hbar}. \quad (5.20)$$

Уравнения (5.19) являются точными уравнениями. Они образуют бесконечную систему связанных уравнений для амплитуд вероятностей $c_n(t)$. Эта система эквивалентна исходному уравнению (5.11). Матричные элементы $\langle n | H_1 | s \rangle$ характеризуют энергию возмущения. Они вычисляются с помощью собственных векторов состояний невозмущенного гамильтониана.

Для решения этих уравнений необходимо использовать приближенный способ. Обычно при таком способе решения встречаются два случая. Их можно описать следующим образом. Пусть член взаимодействия пропорционален некоторой константе взаимодействия, которую мы обозначим через k . Когда мы имеем дело с взаимодействием электрона с полем (5.6), то эта константа пропорциональна заряду электрона e . Внешнее воздействие возмущения может осуществляться в течение интервала времени t , малого по сравнению с временем $1/k$. В этом случае бывает весьма удобным разложение решений в ряд теории возмущений по степеням величины kt . В другом случае, когда внешнее воздействие возмущения длится в течение интервала времени, большого по сравнению с $1/k$, ряд по степеням величины kt сходится слишком медленно. В этом случае используется другой способ приближенного решения, который называется приближением Вигнера — Вайскопфа и который мы рассмотрим в одном из следующих разделов [28].

Если время взаимодействия мало по сравнению с временем $1/k$, то коэффициенты $c_s(t)$ в (5.19) могут быть разложены в степенной ряд по величине k :

$$c_s(t) = c_s^{(0)}(t) + c_s^{(1)}(t) + c_s^{(2)}(t) + \dots, \quad (5.21)$$

где $c_s^{(1)}(t)$ по величине оказывается порядка k , $c_s^{(2)}(t)$ — порядка k^2 и т. д. Подставляя разложение (5.21) в систему (5.19) и приравнивая между собой члены одного порядка по k , мы получим систему приближенных уравнений:

$$i\hbar \frac{dc_n^{(0)}(t)}{dt} = 0, \quad (5.22)$$

$$i\hbar \frac{dc_n^{(1)}(t)}{dt} = \sum_s \langle n | H_1 | s \rangle e^{i\omega_{ns}t} c_s^{(0)}(t), \quad (5.23)$$

$$i\hbar \frac{dc_n^{(2)}(t)}{dt} = \sum_s \langle n | H_1 | s \rangle e^{i\omega_{ns}t} c_s^{(1)}(t) \quad (5.24)$$

и т. д. Если в гамильтониане имеется член H_2 порядка k^2 , то его следует включить в уравнение (5.24).

Будем последовательно решать эти уравнения. Согласно уравнению (5.22) в нулевом порядке по величине k мы имеем

$$c_n^{(0)}(t) = \text{const.} \quad (5.25)$$

Это соответствует тому обстоятельству, что при отсутствии взаимодействия ($k = 0$) состояние системы не меняется с течением времени. В большинстве интересных случаев система начинает взаимодействовать с внешним возмущением, находясь в определенном собственном состоянии гамильтониана H_0 , например в состоянии $|i\rangle$. Тогда (5.25) переходит в

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni} = \langle n | i \rangle. \quad (5.26)$$

При таком выборе начального состояния системы сумма в уравнениях первого порядка (5.23) сводится к одному члену, и мы получаем

$$i\hbar \frac{dc_n^{(1)}(t)}{dt} = \langle n | H_1 | i \rangle e^{i\omega_{ni}t}. \quad (5.27)$$

В тех случаях, когда гамильтониан H_1 не зависит от времени, уравнения (5.27) можно проинтегрировать и получить в результате следующее выражение:

$$i\hbar c_f^{(1)}(t) = \langle f | H_1 | i \rangle \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{i\omega_{fi}}, \quad (5.28)$$

где состояние $\langle f |$ есть конечное состояние системы. При этом согласно (5.26), если начальное и конечное состояния системы различны, то величина $c_f^{(1)}(0) = 0$. Иначе говоря, предполагается, что в начальный момент времени $t = 0$ конечное состояние оказывается свободным.

Вероятность нахождения системы в состоянии $|f\rangle$ в момент времени t , если в начальный момент времени $t=0$ она находилась в состоянии $|i\rangle$, приближенно определяется соотношением

$$|c_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{4}{\hbar^2} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \frac{\sin^2(1/2 \omega_{fi} t)}{\omega_{fi}^2}. \quad (5.29)$$

Вероятность перехода из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$ оказывается порядка k^2 . Обычно говорят, что возмущение H_1 индуцирует в системе переходы из состояния $|i\rangle$ в состояние $|f\rangle$.

Возникает вопрос: что такое $|c_i^{(1)}(t)|^2$ в этом приближении? Для того чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим опять соотношение (5.27) для случая, когда $|n\rangle \equiv |i\rangle$. Так как согласно (5.20) $\omega_{ii} = 0$ и, кроме того, во многих случаях

$$\langle i | H_1 | i \rangle \equiv 0,$$

то из (5.27) следует, что

$$c_i^{(1)}(t) = \text{const.}$$

Согласно соотношениям (5.24) и (5.26) и условию нормировки (5.17) эта постоянная должна быть равна нулю. Фактически это означает, что выбранное приближение с точностью до членов порядка k^2 справедливо лишь для достаточно коротких промежутков времени, т. е. до тех пор, пока исходное и конечное состояния не изменятся слишком сильно. Иными словами, время жизни исходного состояния предполагается достаточно большим.

То же самое можно показать другим способом. Множитель

$$\sin^2(1/2 \omega_{fi} t) / \omega_{fi}^2 \quad (5.30)$$

в соотношении (5.29), рассматриваемый как функция ω_{fi} , имеет очень острый максимум при $\omega_{fi} = 0$. В максимуме

его значение равно $t^2/4$ и стремится очень быстро к нулю при $\omega_{fi}t > 2\pi$. Таким образом, в случае $\omega_{fi} \approx 0$ выражение (5.29) оказывается пропорциональным k^2t^2 , и, как и предполагалось, разложение (5.21) является разложением по степеням kt , быстро сходящимся лишь при $kt \ll 1$. Это означает, что время взаимодействия должно быть мало по сравнению с k^{-1} . Это обстоятельство следует учитывать при использовании полученных результатов.

Как следует из (5.29), вероятность того, что возмущение H_1 индуцирует переход между исходным и конечным состояниями, практически равна нулю, за исключением случая, когда $\omega_{fi} \approx 0$. Согласно (5.20) это значит, что

$$E_f \approx E_i. \quad (5.31)$$

Это закон сохранения энергии. Он указывает на то, что переходы между двумя состояниями возможны лишь в тех случаях, когда их энергии примерно одинаковы. При этом сами состояния могут быть различными. Этот закон сохранения не был введен в теорию в качестве исходного постулата, а явился ее следствием.

Рассмотрим теперь пример, когда начальное и конечное состояния различны ($|i\rangle \neq |f\rangle$), в то время как их энергии одинаковы ($E_i = E_f$) (этот пример понадобится нам в следующем разделе). Рассмотрим атом, имеющий два дискретных энергетических уровня, например $|a\rangle$ и $|b\rangle$, с энергиями E_a и E_b соответственно, и фотон с энергией $\hbar\omega$. Начальное состояние системы пусть состоит из одного фотона поля излучения и атома в нижнем состоянии $|b\rangle$. Это начальное состояние описывается кет-вектором $|i\rangle$ и энергией E_i вида

$$|i\rangle = |b, 1\rangle, \quad E_i = E_b + \hbar\omega.$$

Конечным состоянием пусть будет атом в верхнем состоянии $|a\rangle$ в отсутствие фотона. Тогда кет-вектор конечного состояния и его энергия имеют вид

$$|f\rangle = |a, 0\rangle, \quad E_f = E_a.$$

Состояния $|i\rangle$ и $|f\rangle$ не одинаковы. Энергии же этих состояний равны, если

$$\hbar\omega = E_a - E_b.$$

Как показывает этот пример, в большинстве случаев нас будут интересовать переходы не между двумя дискретными состояниями, а между дискретным исходным состоянием и группой близко расположенных, почти совпадающих по энергии конечных состояний или между группой близко расположенных начальных состояний и дискретным конечным состоянием. В этих случаях начальное и конечное состояния практически рассматриваются как непрерывные состояния. В предыдущем разделе был рассмотрен пример, когда падающая электромагнитная волна имеет некоторое частотное распределение и при этом нас интересует полная вероятность переходов, вызванных квантами с частотами, почти равными $(E_a - E_b)/\hbar$.

Рассмотрим теперь случай, когда исходное состояние дискретно, а конечное состояние представляет собой группу близко расположенных, почти совпадающих между собой по энергии состояний. Полную вероятность перехода мы получим, суммируя (5.29) по группе конечных состояний, т. е.

$$\sum_f |c_f^{(1)}(t)|^2 = \sum_f \frac{4}{\hbar^2} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \frac{\sin^2(1/2 \omega_{fi} t)}{\omega_{fi}^2}. \quad (5.32)$$

Мы неявно предположили, что система находится в большой кубической полости объема L^3 , на границах которой система удовлетворяет периодическим граничным условиям. Если теперь перейти к пределу $L \rightarrow \infty$ так, как это указано в разделе 4.6, то вместо (5.32) получим

$$\sum_f |c_f^{(1)}(t)|^2 \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{4}{\hbar^2} \int dE_f \rho(E_f) |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \frac{\sin^2(1/2 \omega_{fi} t)}{\omega_{fi}^2}, \quad (5.33)$$

где $\rho(E_f) dE_f$ — число конечных состояний с энергиями между E_f и $E_f + dE_f$. Так как согласно (5.20) $E_f - E_i = \hbar \omega_{fi}$, а E_i дискретно, то

$$dE_f = \hbar d\omega_{fi}. \quad (5.34)$$

Так как подынтегральное выражение в (5.33) имеет острый максимум при $\omega_{fi} = 0$, то пределы интегрирования можно расширить на всю действительную ось от $-\infty$ до $+\infty$. Тогда получим

$$\sum_f |c_f^{(1)}(t)|^2 \rightarrow \frac{4}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_{fi} \rho(E_f) |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \frac{\sin^2(1/2 \omega_{fi} t)}{\omega_{fi}^2}. \quad (5.35)$$

Обычно матричные элементы $|\langle f | H_1 | i \rangle|^2$ и плотность состояний являются медленно меняющимися функциями ω_{fi} и могут быть вынесены за знак интеграла. Так как

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(1/2 xt)}{x^2} dx = \frac{\pi}{2} t, \quad (5.36)$$

то приближенно из (5.35) следует:

$$\sum_f |c_f^{(1)}(t)|^2 = t \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(E_f).$$

Полная вероятность перехода за единицу времени равна

$$w = \frac{d}{dt} \sum_f |c_f^{(1)}(t)|^2 \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(E_f). \quad (5.37)$$

Это соотношение называется золотым правилом Ферми. Оно дает вероятность перехода системы из начального дискретного состояния $|i\rangle$ в группу близко расположенных (по энергии или частоте) конечных состояний, для которых $E_f \approx E_i$. Функция $\rho(E_f)$ есть плотность числа конечных состояний в интервале dE_f около E_f . Соотношение (5.37) — одно из полезнейших в теории возмущений, зависящих от времени.

5.4. Поглощение излучения атомом

Применим полученные в предыдущем разделе результаты к поглощению фотона атомом. Согласно (5.5) невозмущенный гамильтониан равен

$$H_0 = H_a + H_r, \quad (5.38)$$

где H_a — невозмущенный гамильтониан атома (5.3) и H_r — гамильтониан свободного квантованного поля излучения (5.4).

Энергетические собственные состояния свободного атома удовлетворяют уравнению

$$H_a |s\rangle = E_s |s\rangle, \quad (5.39)$$

где E_s — энергия атома в состоянии $|s\rangle$. Собственные состояния поля излучения с поляризацией σ , импульсом

$\hbar k_l$ и энергией $\hbar\omega_l$ удовлетворяют уравнению

$$\hbar\omega_l a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma} |n_{l\sigma}\rangle = \hbar\omega_l n_{l\sigma} |n_{l\sigma}\rangle. \quad (5.40)$$

В тех случаях, когда это не может привести к недоразумениям, мы заменим $n_{l\sigma}$ просто на n_l . Невозмущенное состояние гамильтониана H_0 может быть записано в виде

$$|s, n_1, n_2, \dots, n_l, \dots\rangle \equiv |s\rangle |n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_l\rangle \dots \quad (5.41)$$

с собственным значением

$$E_s + \hbar\omega_1 n_1 + \hbar\omega_2 n_2 + \dots + \hbar\omega_l n_l + \dots \quad (5.42)$$

Члены $1/2\hbar\omega_l$ в соотношении (5.4), представляющие энергию нулевых колебаний, можно отбросить, если изменить уровень, от которого отсчитывается энергия. Эти члены можно было бы и сохранить, но это лишь усложнило бы формулу. Возмущение первого порядка H_1 дается соотношениями (5.6) и (5.8):

$$H_1 = -\frac{e}{m} \sum_{l,\sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} \{a_{l\sigma} \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) + a_{l\sigma}^+ \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})\} (\epsilon_{l\sigma} \mathbf{p}). \quad (5.43)$$

(Не следует путать e — заряд электрона и $\epsilon_{l\sigma}$ — вектор поляризации фотона.)

Нам понадобятся матричные элементы возмущения H_1 , соответствующие двум невозмущенным собственным состояниям, подобным (5.41). Если воспользоваться соотношениями (4.100) и ортонормированностью, то получим

$$\begin{aligned} \langle s; n_1, n_2, \dots, n_l, \dots | H_1 | s'; n_1, n_2, \dots, n_l \pm 1, \dots \rangle = \\ = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} \left\{ \sqrt{n_l + 1} (\epsilon_{l\sigma} \langle s | e^{i\mathbf{k}_l \mathbf{r}} \mathbf{p} | s' \rangle), \right. \\ \left. \sqrt{n_l} (\epsilon_{l\sigma} \langle s | e^{-i\mathbf{k}_l \mathbf{r}} \mathbf{p} | s' \rangle). \right. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Верхнее выражение относится к состоянию $(n_l + 1)$, нижнее — к состоянию $(n_l - 1)$.

Воспользуемся теперь предположением, что длина волны излучения много больше размеров атома. В этом случае экспоненциальный множитель $\exp(\pm i\mathbf{k}_l \mathbf{r})$ можно считать постоянным в матричном элементе

$$\langle s | \exp(\pm i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) \mathbf{p} | s' \rangle, \quad (5.45)$$

и он может быть вынесен за знак интеграла в (5.45). Это предположение не является существенным, но оно сильно облегчает вычисление (5.45). Для вычисления (5.45) рассмотрим гейзенберговские уравнения движения для радиуса-вектора \mathbf{x} , т. е.

$$i\hbar \frac{d\mathbf{x}}{dt} = [\mathbf{x}, H_a] = \left[\mathbf{x}, \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + eV(\mathbf{x}) \right] \quad (5.46)$$

(см. задачу 5.1). Так как \mathbf{x} коммутирует с $V(\mathbf{x})$, то, используя (1.119):

$$[x_i, p_j^l] = i\hbar l p_j^{l-1} \delta_{ij}, \quad (5.47)$$

получим, что (5.46) переходит в следующее уравнение:

$$i\hbar \frac{d\mathbf{x}}{dt} = i\hbar \frac{\mathbf{p}}{m} = [\mathbf{x}, H_a]. \quad (5.48)$$

Вектор $\mathbf{x} = \mathbf{r}$ имеет компоненты x_i ($i = 1, 2, 3$), которые играют роль q в соотношении (1.119). Коммутационные соотношения (1.117) обобщены на случай трех измерений, так что $[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$, $[q_i, q_j] = [p_i, p_j] = 0$. Таким образом, координаты и импульсы, соответствующие разным степеням свободы, коммутируют друг с другом. Если вычислить матричные элементы обеих частей (5.48), то с учетом (5.39) получим

$$\frac{i\hbar}{m} \langle s | \mathbf{p} | s' \rangle = (E_{s'} - E_s) \langle s | \mathbf{x} | s' \rangle. \quad (5.49)$$

Подставляя это в (5.44), получим искомые матричные элементы

$$\begin{aligned} & \langle s; n_1, \dots, n_l, \dots | H_1 | s'; n_1, \dots, n_l \pm 1, \dots \rangle = \\ & = -\frac{ie(E_s - E_{s'})}{\hbar} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} \left\{ \begin{aligned} & \sqrt{n_l + 1} \exp(ik_l r) (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ss'}), \\ & \sqrt{n_l} \exp(-ik_l r) (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ss'}), \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (5.50)$$

где

$$\mathbf{x}_{ss'} = \langle s | \mathbf{x} | s' \rangle. \quad (5.51)$$

Величина $e\mathbf{x}_{ss'}$ называется электрическим дипольным моментом атома, соответствующим переходу между состояниями $|s\rangle$ и $|s'\rangle$, а величина $e\mathbf{x}_{ss}$ называется дипольным моментом состояния $|s\rangle$.

Так как собственные энергии начального и конечного состояний согласно (5.50) равны

$$\begin{aligned} E_s + n_1 \hbar \omega_1 + \dots + n_l \hbar \omega_l + \dots, \\ E_{s'} + n_1 \hbar \omega_1 + \dots + (n_l \pm 1) \hbar \omega_l + \dots, \end{aligned} \quad (5.52)$$

то для выполнения закона сохранения энергии следует положить

$$E_s - E_{s'} \approx \pm \hbar \omega_l. \quad (5.53)$$

Эти предварительные результаты можно применить к теории поглощения фотона атомом, которую мы рассмотрим ниже, и к теории излучения, которая будет рассмотрена в следующем разделе.

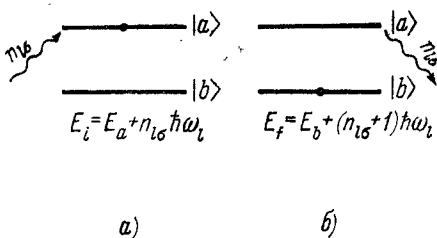


Рис. 6. Схематическое представление однофотонного поглощения атомом.

Пусть атом, обладающий двумя энергетическими состояниями, первоначально находится в нижнем состоянии $|b\rangle$.

Предположим также, что на этот атом падают $n_{l\sigma}$ квантов с поляризацией σ , импульсом $\hbar \mathbf{k}_l$ и энергией $\hbar \omega_l$. Если один квант поглотится, то атом перейдет в возбужденное состояние $|a\rangle$. Эти состояния, начальное и конечное, схематически показаны на рис. 6.

Матричный элемент (5.50) для процесса поглощения определяется соотношением

$$|\langle f | H_1 | i \rangle|^2 = \frac{n_{l\sigma} \hbar \omega_l}{2\varepsilon_0 L^3} e^2 |(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ab})|^2, \quad (5.54)$$

где мы использовали закон сохранения энергии (5.53) и положили $L^3 = \tau$.

В общем случае пучок фотонов может не быть строго монохроматическим. Он может иметь некоторое частотное распределение. Нас интересует полная вероятность поглощения падающих фотонов за секунду, если их частота лежит в интервале между ω_l и $\omega_l + d\omega_l$. В связи с этим в (5.37) мы должны подставлять $\rho(E_i)$, а не $\rho(E_f)$ (см. задачу 5.2), где $\rho(E_i)dE_i$ — число падающих фотонов с энергией между E_i и $E_i + dE_i$, поляризацией σ и в телесном угле $d\Omega$ вблизи направления k_l . Так как

$$E_i = \hbar\omega_l = \hbar ck_l,$$

то согласно (4.116) получаем

$$\rho(E_i)dE_i = dN = \frac{L^3}{(2\pi c)^3} dE_i d\Omega \frac{\omega_l^2}{\hbar} = \frac{L^3}{(2\pi c)^3} \omega_l^2 d\omega_l d\Omega, \quad (5.55)$$

и, следовательно,

$$\rho(E_i) = \frac{L^3}{(2\pi c)^3} \frac{\omega_l^2}{\hbar} d\Omega. \quad (5.56)$$

Золотое правило (5.37) утверждает, что полная вероятность поглощения за секунду фотона с поляризацией σ , энергией в интервале между $\hbar\omega_l$ и $\hbar(\omega_l + d\omega_l)$ в телесном угле $d\Omega$ вблизи направления k_l оказывается равной

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(E_i) = \frac{\pi}{\hbar^2} \frac{e^2}{\epsilon_0 c} |(e_{l\sigma} x_{ab})|^2 \frac{n_{l\sigma} \hbar\omega_l}{(2\pi)^3 c^2}, \quad (5.57)$$

если учесть соотношения (5.54) и (5.56). Последний множитель может быть выражен через интенсивность падающего излучения следующим образом.

Число типов колебаний в рассматриваемой полости, приходящихся на телесный угол $d\Omega$, определяется соотношением (5.55). Плотность энергии данного типа колебаний, т. е. плотность энергии фотонов, приходящаяся на один тип колебаний, из (5.55) равна

$$\frac{\hbar\omega_l n_{l\sigma}}{L^3} \frac{\text{энергия}}{\text{объем/тип колебания}}. \quad (5.58)$$

Эта энергия распространяется со скоростью c , так что через единицу площади в секунду в частотном интервале $d\omega_l$

проходит энергия

$$I_0(\omega_l) d\omega_l = \frac{\hbar\omega_l n_{l\sigma}}{L^3} c dN = \frac{\hbar\omega_l^3 n_{l\sigma}}{(2\pi)^3 c^2} d\Omega d\omega_l. \quad (5.59)$$

Подставляя это в (5.57), получим для вероятности поглощения за секунду фотона с заданной поляризацией и т. д. следующее выражение:

$$w = \frac{\pi}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} e^2 |(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ab})|^2 I_0(\omega_l). \quad (5.60)$$

Поглощаемая мощность оказывается равной

$$P = \hbar\omega_l w = \frac{\pi}{\hbar} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} e^2 |(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ab})|^2 \omega_l I_0(\omega_l). \quad (5.61)$$

Так как обычно падающее излучение бывает не поляризовано, то выражения (5.60) и (5.61) следует усреднить по всем направлениям поляризации относительно дипольного момента атома \mathbf{x}_{ab} . Если \mathbf{x}_{ab} направить вдоль оси z , то

$$\begin{aligned} \overline{|(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ab})|^2} &= |\mathbf{x}_{ab}|^2 \overline{\cos^2 \theta} = \\ &= |\mathbf{x}_{ab}|^2 \frac{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta}{4\pi} = \frac{|\mathbf{x}_{ab}|^2}{3}, \end{aligned} \quad (5.62)$$

где θ — угол между \mathbf{x}_{ab} и осью $\mathbf{e}_{l\sigma}$. Соответственно средняя по всем поляризациям поглощаемая мощность равна

$$P_{\text{abs}} = \frac{\pi}{3} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \frac{e^2 |\mathbf{x}_{ab}|^2}{\hbar} \omega_l I_0(\omega_l) = \hbar\omega_l w_{\text{abs}}. \quad (5.63)$$

Для того чтобы вычислить \mathbf{x}_{ab} , нужно знать волновые функции атома в состояниях $|a\rangle$ и $|b\rangle$ (см. задачу 5.3).

Таким образом, в этом разделе мы показали, что из теории квантованных полей следует теория поглощения фотонов.

5.5. Индуцированное и спонтанное излучение возбужденного атома

Атом, первоначально находившийся в возбужденном состоянии $|a\rangle$, может спонтанно совершить переход в более низкое состояние $|b\rangle$, испустив фотон с энергией

$$\hbar\omega_l = E_a - E_b.$$

Этот фотон может иметь любую поляризацию σ и произвольную частоту в интервале от ω_l до $\omega_l + d\omega_l$. Кроме того, если возбужденный атом подвергается облучению светом частоты ω_l , приближенно равной $(E_a - E_b)/\hbar$, то падающий свет может индуцировать переход атома

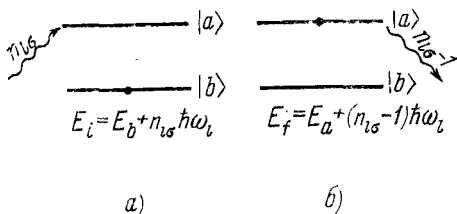


Рис. 7. Схематическое представление однофотонного излучения атома в возбужденном состоянии.

из состояния $|a\rangle$ в состояние $|b\rangle$ с испусканием фотона. Как индуцированное, так и спонтанное излучения автоматически следуют из теории, если поле излучения проквантовано.

На рис. 7 схематически показаны начальное и конечное состояния возбужденного атома в поле излучения.

Мы хотим вычислить полную вероятность излучения кванта в секунду.

Матричные элементы взаимодействия (5.50) для переходов между начальным и конечным состояниями, показанными на рис. 7, равны

$$|\langle f | H_1 | i \rangle|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_l (n_{l\sigma} + 1)}{2\epsilon_0 L^3} |(\mathbf{e}_{l\sigma} \cdot \mathbf{x}_{ab})|^2. \quad (5.64)$$

Рассмотрим множитель $(n_{l\sigma} + 1)$. В нем слагаемое $n_{l\sigma}$ связывают с индуцированным излучением, так как его при-

существование обусловлено взаимодействием атома с полем излучения. Когда $n_{l\sigma} = 0$, т. е. поле излучения отсутствует, переходы между двумя состояниями все еще могут происходить, а возникающее при этом излучение называется спонтанным.

Для того чтобы вычислить вероятность перехода за секунду с помощью золотого правила (5.37), члены с индуцированным и спонтанным излучением должны быть рассмотрены отдельно и различно. Причина этого очевидна. В случае индуцированного излучения в падающем свете имеется некоторое распределение по частоте и усреднение можно производить точно так, как это делалось в случае поглощения в предыдущем разделе. Результат вычислений будет тем же самым, т. е. согласно (5.60) имеем

$$w_{\text{ind}} = \frac{\pi}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} e^2 |(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ab})|^2 I_0(\omega_l). \quad (5.65)$$

Таким образом, вероятности поглощения и индуцированного излучения оказываются равными.

Член, соответствующий спонтанному излучению, никак не связан с падающей волной. Поэтому мы должны усреднять по набору конечных состояний, так как фотон может быть испущен с произвольной поляризацией и любой энергией в интервале от ω_l до $\omega_l + d\omega_l$ в телесном угле $d\Omega$. Поэтому нужно просуммировать по всему телесному углу 4π . Согласно золотому правилу (когда $n_{l\sigma} = 0$ в (5.64))

$$\begin{aligned} w_{\text{sp}} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(E_f) = \\ &= \frac{\omega_l^2 e^2}{8\pi^2 c^2 \hbar} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} |(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}_{ab})|^2 d\Omega, \quad (5.66) \end{aligned}$$

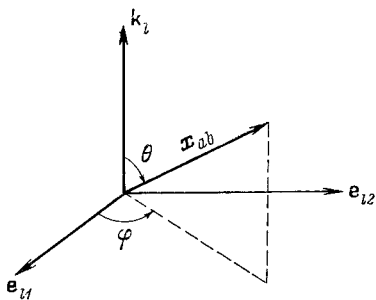


Рис. 8. Удобный выбор координат для расчета общего спонтанного излучения атома.

где $\rho(E_f)$ определяется соотношением типа (5.55). Для того чтобы получить полную вероятность спонтанного излучения в секунду, это выражение необходимо усреднить по всем направлениям поляризации и проинтегрировать по всему телесному углу вокруг излучающего атома. Для этих расчетов оси координат расположим, как на рис. 8. В этой координатной системе имеем

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_{ab} &= |x_{ab}| (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta), \\ \boldsymbol{e}_{l_1} &= [1, 0, 0], \quad \boldsymbol{e}_{l_2} = [0, 1, 0], \quad \boldsymbol{k}_l = [0, 0, 1]. \end{aligned} \quad (5.67a)$$

Суммировать (5.66) по всем поляризациям очень просто:

$$\sum_{\sigma=1}^2 |(\boldsymbol{e}_{l_\sigma} \boldsymbol{x}_{ab})|^2 = |x_{ab}|^2 \sin^2 \theta \quad (5.67b)$$

(сравните с (5.62)). Подставляя это выражение в (5.66) и выполняя суммирование по всем углам, получим

$$w_{sp} = \frac{\omega_l^3}{3\pi c^2 \hbar} e^2 |x_{ab}|^2 \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}. \quad (5.68)$$

Это полная вероятность перехода возбужденного атома в секунду с испусканием фотона любой поляризации и энергии вблизи $E_a - E_b$. Полная мощность излучения равна

$$P_{sp} = \hbar \omega_l w_{sp} = \frac{\omega_l^4}{3\pi c^2} e^2 |x_{ab}|^2 \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}. \quad (5.69)$$

Следует заметить, что единица в формуле (5.64) возникает из-за некоммутативности операторов $a_{l\sigma}$ и $a_{l\sigma}^\dagger$: $[a_{l\sigma}, a_{l\sigma}^\dagger] = 1$. Если поле не квантовано, она не появляется.

Таким образом, дираковская теория впервые объяснила спонтанное излучение возбужденных атомов.

5.6. Теория естественной ширины линии излучения

В теории излучения и поглощения света, изложенной в разделах 5.4 и 5.5, мы предполагали, что атомные энергетические уровни бесконечно узки, в то время как из эксперимента мы знаем, что наблюдаемые линии излучения и поглощения обладают конечной шириной. Имеется много

причин, из-за которых атомные уровни не являются бесконечно узкими, но наиболее фундаментальной причиной является обратное влияние на атом излучаемого электромагнитного поля. Это приводит к уширению спектральной линии излучения. Ширина линии, обусловленная этим эффектом, называется естественной шириной спектральной линии. Та же причина приводит к лэмбовскому сдвигу атомных уровней и появлению квантовых шумов.

Уширение резонансной линии можно видеть и на классических примерах. Рассмотрим два высокочастотных резонансных контура, не связанных между собой и настроенных на одну и ту же частоту. Если эти контуры слабо связать между собой, то они будут иметь два нормальных типа колебаний, причем частота одного из этих типов будет немного больше частоты несвязанных контуров, а частота другого — немного меньше частоты несвязанных контуров. Если связать между собой много таких контуров, то резонансные частоты распределятся в полосе вблизи резонансной частоты несвязанных контуров. В случае атома и поля излучения атомный резонанс оказывается слабо связанным со многими электромагнитными осцилляторами, частоты которых приближенно равны атомной частоте. В результате этого атомный резонанс расширяется в полосу. В этом случае говорят, что спектральная линия атома имеет некоторую конечную ширину или что она однородно уширена.

Наличие естественной ширины линии можно доказать, исходя из соотношения неопределенностей

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar. \quad (5.70)$$

Это соотношение утверждает, что для измерения энергии атома с точностью до ΔE необходимо время Δt . Возбужденный атом спонтанно излучает энергию и переходит в нижнее состояние. Для измерения энергии нужно, чтобы атом сделал переход в нижнее состояние, и поэтому, если в среднем атом до излучения остается в верхнем состоянии в течение времени τ (эта величина называется временем жизни), то для измерения энергии необходимо время не меньше τ . Таким образом, согласно (5.70) энергия может быть измерена с точностью до величины

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\tau}, \quad (5.71)$$

которая и является естественной шириной линии. Ниже мы покажем, что величина $1/\tau$ примерно равна вероятности перехода в секунду при спонтанном излучении.

В разделе 5.3 мы указывали, что теория возмущений, зависящих от времени, справедлива лишь при достаточно малых временах, когда начальное состояние мало изменяется в процессе взаимодействия. С другой стороны, если мы измеряем расстояние между уровнями первоначально возбужденного атома, то для такого измерения состояние атома должно измениться. Иными словами, мы должны ждать столько времени, чтобы состояние атома изменилось значительно. Отсюда мы делаем вывод, что теория возмущений к данному случаю не подходит, и предлагаем другой приближенный метод решения уравнений (5.19). Этот метод называется приближением Вигнера — Вайскопфа [28].

Бесконечная система уравнений (5.19) является точной и эквивалентна уравнению Шредингера в представлении взаимодействия. Согласно Вигнеру и Вайскопфу, мы должны сделать упрощающее предположение, состоящее в том, что при матричном умножении на правую часть уравнений (5.19) следует принимать во внимание лишь два состояния: начальное состояние $|i\rangle = |a, 0\rangle$, которое содержит атом в возбужденном состоянии и не содержит фотонов, и конечное состояние $|f\rangle = |b, 1\rangle$, которое содержит атом в невозбужденном состоянии и один фотон. Эти состояния в виде диаграммы представлены на рис. 7. Так как излученный фотон может иметь набор частот, а также различные направления распространения и поляризации, то система (5.19) при указанных предположениях принимает следующий вид:

$$i\hbar \frac{dc_f}{dt} = \langle f | H_1 | i \rangle c_i(t) e^{i\omega_{fi}t}, \quad (5.72a)$$

$$i\hbar \frac{dc_i}{dt} = \sum_f \langle i | H_1 | f \rangle c_f(t) e^{-i\omega_{fi}t}, \quad (5.72b)$$

где

$$\hbar\omega_{fi} = E_b + \hbar\omega_l - E_a = \hbar(\omega_l - \omega_0),$$

E_a и E_b — энергии состояний атома, $\hbar\omega_l$ — энергия излученного фотона. Пренебрежение не равными нулю ма-

тричными элементами, связанными с другими состояниями, не может быть обосновано на данном этапе. Мы знаем, что при слабой связи атома с полем излучения не следует ожидать рождения нескольких фотонов, но это не обосновывает указанного пренебрежения. По существу, лишь согласие с экспериментом является обоснованием уравнений (5.72).

Так как начальное состояние имеет конечное время жизни, то в качестве исходного нельзя брать состояние при $t = -\infty$, так как в этом случае трудно ждать полезной информации при $t = 0$. Вслед за Вигнером и Вайскопфом предположим, что взаимодействие атома с полем излучения может быть включено при $t = 0$, когда система находится в определенном состоянии, т. е. мы предполагаем, что при $t = 0$

$$c_i(0) = 1, \quad c_f(0) = 0 \quad \text{для всех } f. \quad (5.73)$$

Уравнения (5.72) описывают переходные процессы, вызванные «включением» взаимодействия при $t = 0$, которые очень чувствительны к выбору начальных условий (5.73). Поэтому решения, полученные при начальных условиях (5.73), будут описывать реальный процесс лишь после того, как эти переходные процессы затухнут.

Найдем решение системы (5.72) при условиях (5.73). Проинтегрируем (5.72a) и подставим полученное уравнение в (5.72b). В результате получим

$$c_f(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle f | H_1 | i \rangle \int_0^t c_i(t') e^{i\omega_f t'} dt', \quad (5.74a)$$

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_f |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \int_0^t e^{i\omega_{fi}(t'-t)} c_i(t') dt'. \quad (5.74b)$$

(Мы воспользовались соотношением $\langle i | H_1 | f \rangle = \langle f | H_1 | i \rangle^*$ из гл. I, которое справедливо в силу эрмитовости H_1 .) Уравнение (5.74b) является интегро-дифференциальным уравнением относительно $c_i(t)$ и может быть решено с помощью преобразований Лапласа. Пусть

$$c_i(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} c_i(t) dt \equiv L \{c_i(t)\}. \quad (5.75)$$

Отсюда в силу условий (5.73) следует, что

$$sc_i(s) - 1 = \int_0^{\infty} e^{-st} \frac{dc_i}{dt} dt \equiv L \left\{ \frac{dc_i}{dt} \right\}, \quad (5.76)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-st} \left\{ \int_0^t e^{i\omega_{fi}(t'-t)} c_i(t') dt' \right\} dt = \\ = \int_0^{\infty} c_i(t') dt' \int_{i'}^{\infty} e^{-(s+i\omega_{fi})t'} dt e^{+i\omega_{fi}t'} = \frac{c_i(s)}{s + i\omega_{fi}}. \quad (5.77)$$

Подставляя эти соотношения в (5.74), получим

$$c_i(s) = \frac{1}{s + \frac{1}{\hbar^2} \sum_f \frac{|\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{s + i\omega_{fi}}}. \quad (5.78)$$

Для того чтобы найти $c_i(t)$, нужно совершить обратное преобразование Лапласа над соотношением (5.78). Из теории преобразований Лапласа известно, что такое преобразование определяется следующим интегралом [29]:

$$c_i(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} \frac{e^{st} ds}{s + \frac{1}{\hbar^2} \sum_f \frac{|\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{s + i\omega_{fi}}}, \quad (5.79)$$

где переменная s считается комплексной в подынтегральном выражении, а ε — малое действительное положительное число; путь интегрирования считается параллельным мнимой оси. Так как вычислить точно этот интеграл не удастся, то следует сделать некоторые приближения.

Прежде всего заметим, что в отсутствие взаимодействия атома с полем излучения ($H_1 = 0$) $c_i(t)$ имеет вид

$$c_i(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} \frac{e^{st} ds}{s}.$$

Подынтегральное выражение имеет простой полюс при $s = 0$. Интеграл вычисляется с помощью теории вычетов, и в результате получаем $c_i(t) = 1$. Таким образом, в от-

существование взаимодействия начальное состояние системы не меняется.

Прежде чем сделать приближенные предположения, заменим переменную интегрирования. Пусть

$$s = \varepsilon + iy.$$

Тогда (5.79) принимает вид

$$c_i(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{\varepsilon t} e^{iyt} dy}{y - i\varepsilon - \frac{1}{\hbar^2} \sum_f \frac{|\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{y + \omega_{fi} - i\varepsilon}}. \quad (5.80)$$

Рассмотрим теперь член, описывающий взаимодействие, в знаменателе подынтегрального выражения. Если конечные состояния распределены с плотностью $\rho(\omega_f)d\omega_f$, то суммирование можно заменить интегрированием. В результате получим

$$I = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_f \frac{|\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{y + \omega_{fi} - i\varepsilon} \rightarrow -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Gamma_{fi} d\omega_f}{\omega_f - \omega_i + y - i\varepsilon}, \quad (5.81a)$$

где $\omega_{fi} = \omega_f - \omega_i = \omega_f - \omega_0$ и

$$\Gamma_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(\omega_f). \quad (5.81b)$$

Пределы интегрирования оказалось возможным расширить до бесконечности потому, что подынтегральное выражение имеет острый максимум при $\omega_f = \omega_i - y$. При этом функция Γ_{fi} предполагается медленно меняющейся функцией ω_f . (Величина ε считается малой и положительной.) Из теории комплексных интегралов известно [25], что если $f(x)$ — регулярная функция, не имеющая полюсов при $x = a$, то

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x) dx}{x-a} = \mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x) dx}{x-a} \right\} + \pi i f(a), \quad (5.82)$$

где \mathcal{P} означает главную часть интеграла в смысле Коши и определяется соотношением

$$\mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x) dx}{x-a} \right\} = \lim_{\mu \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{a-\mu} \frac{f(x) dx}{x-a} + \int_{a+\mu}^{+\infty} \frac{f(x) dx}{x-a} \right]$$

при условии, что предел с правой стороны существует.

Используя эти результаты и учитывая произвольность ε , выражение (5.81a) можно привести к виду

$$I = - \mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Gamma_{fi} d\omega_f}{\omega_{fi} + y} \right\} - i\pi \Gamma_{fi}(\omega_f = \omega_i - y), \quad (5.81c)$$

если, конечно, функция Γ_{fi} регулярна (иногда это бывает не так).

Если действительная и мнимая части I малы, то y можно заменить величиной $i\varepsilon$, которая может быть сколь угодно близкой к нулю. Это является следующим приближением к $c_i(t)$. Если теперь ввести обозначения

$$\frac{\gamma}{2} = \frac{\pi}{\hbar^2} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(\omega_f) |_{\omega_f = \omega_i}, \quad (5.83)$$

$$\Delta\omega = - \mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho(\omega_f) |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 d\omega_f}{\hbar^2(\omega_f - \omega_i)} \right\}, \quad (5.84)$$

то в первом приближении ($\varepsilon \rightarrow 0$) для выражения (5.80) получаем

$$c_i(t) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{iyt} dy}{y + \Delta\omega - i(\gamma/2)} = \exp\left(-\frac{\gamma t}{2} - i\Delta\omega t\right). \quad (5.85)$$

Теперь мы видим, какое предположение необходимо сделать для того, чтобы перейти от выражения (5.80) к выражению (5.85). Мы знаем, что величина

$$|c_i^r(t)|^2 = e^{-\gamma t} \quad (5.86)$$

равна вероятности найти атом в его исходном состоянии через промежуток времени t . Поэтому величина γ^{-1} является временем жизни атома в исходном состоянии. Из физических соображений ясно, что должно выполняться условие

$$\gamma \ll \frac{E_a - E_b}{\hbar}, \quad (5.87)$$

т. е. время жизни атома в возбужденном состоянии должно быть велико по сравнению с периодом обращения электрона в атоме на его орбите. Более того, согласно (5.83) величина γ имеет смысл лишь при $\omega_f \approx \omega_i$. Следовательно,

на самом деле предполагается, что

$$\gamma = \frac{2\pi}{\hbar^2} |\langle f | H_1 | i \rangle|^2 \rho(\omega_f) |_{\omega_f = \omega_i} \ll \frac{E_a - E_b}{\hbar} \approx \omega_l, \quad (5.88)$$

где ω_l — частота испускаемого фотона. При таком предположении полюс в выражении (5.80) будет очень близок к значению $y = 0$.

При сравнении выражений (5.88) и (5.37) можно видеть, что величина γ в точности равна полной вероятности перехода системы в одно из совокупности ее конечных состояний в единицу времени. При этом величина $\tau = 1/\gamma$ определяет время жизни исходного состояния.

Величина $\Delta\omega$ в выражении (5.85) физически соответствует сдвигу частоты излучения и определяет так называемое лэмбовское смещение частоты излучения. Вычисление величины $\Delta\omega$ по формуле (5.84) представляет собой трудную задачу, которой мы не будем касаться.

Для промежутков времени, когда справедливо выбранное нами приближение (т. е. когда переходные процессы закончились), можно вычислить амплитуду вероятности конечного состояния. Для этого следует выражение (5.85) подставить в формулу (5.74а); получим

$$c_f(t) = - \frac{\langle f | H_1 | i \rangle}{\hbar [\omega_{fi} - \Delta\omega + i(\gamma/2)]} \{ e^{i(\omega_{fi} - \Delta\omega)t - \gamma t/2} - 1 \}. \quad (5.89)$$

Для моментов времени, удовлетворяющих неравенству $\gamma t \ll 1$, вероятность обнаружения атома в нижнем состоянии после испускания одного фотона равна

$$|c_f(t)|^2 = \frac{4 |\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{\hbar^2 [(\omega_{fi} - \Delta\omega)^2 + (\gamma/2)^2]} \sin^2 \frac{(\omega_{fi} - \Delta\omega) t}{2}.$$

Если это выражение просуммировать по конечным состояниям (см. переход от (5.33) к (5.37) и (5.55)), то полная вероятность излучения одного фотона в телесный угол $d\Omega$ окажется равной

$$\sum_f |c_f(t)|^2 \approx 2\pi t \frac{|\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{L^3}{(2\pi c)^3} \omega_l^2 d\Omega, \quad (5.90)$$

где $\hbar\omega_l = E_a - E_b - \Delta\omega$ — энергия испускаемого фотона. Этот результат почти в точности совпадает с тем,

который получается из теории возмущений первого порядка, зависящих от времени, за исключением смещения частоты $\Delta\omega$. В течение некоторого малого времени ($\gamma t \ll 1$) вероятность того, что система остается в исходном состоянии $|i\rangle$, согласно (5.86) практически равна единице. Спектральный состав излучения, испущенного в это время, зависит от того, когда производится измерение этого излучения, и, очевидно, не определяет истинной формы спектральной линии.

Для того чтобы получить уверенные результаты измерения энергии электрона, следует подождать достаточно долго ($\gamma t \gg 1$), чтобы быть уверенным, что переход уже произошел. В этом случае согласно (5.89) имеем

$$|c_f(t)|^2 = \frac{|\langle f | H_1 | i \rangle|^2}{\hbar^2 [(\omega_{fi} - \Delta\omega)^2 + (\gamma/2)^2]}, \quad (5.91)$$

где

$$\hbar\omega_{fi} = E_a - E_b - \hbar\omega_l \equiv \hbar(\omega_0 - \omega_l). \quad (5.92)$$

Частота излученного фотона не имеет определенного значения, и спектральная линия имеет естественную ширину γ . В то же самое время центр спектральной линии смещен на величину $\Delta\omega$. Про спектральные линии, имеющие такую форму, говорят, что они обладают лоренцевским уширением.

Как уширение линии, так и сдвиг частоты возникают вследствие обратного действия излученного поля на атом. Эти эффекты являются следствием нулевых флуктуаций поля. При любом процессе, когда одна система слабо связана с большим числом других систем, будет возникать уширение спектральной линии и смещение частоты. Примеры таких процессов будут рассмотрены в гл. VII при изучении модели мазера и аттенюатора. Там снова понадобится использовать приближение Вигнера — Вайскопфа.

5.7. Эффект Доплера [24]

Хорошо известно, что при движении источника частота излучаемого им электромагнитного поля изменяется. Этот факт объясняется волновой теорией света. Его можно очень просто объяснить также и с помощью квантовой теории, в которой он является следствием законов сохранения энергии и импульса.

Когда атом, первоначально находящийся в покое в состоянии $|a\rangle$, переходит в состояние $|b\rangle$, то он излучает квант света с частотой

$$\omega = \frac{E_a - E_b}{\hbar} \quad (5.93)$$

и импульсом $\hbar \mathbf{k} = \hbar \omega \mathbf{k}/c$.

Теперь предположим, что атом массы m , находящийся в возбужденном состоянии $|a\rangle$, движется с нерелятивистской скоростью \mathbf{v} . Начальная энергия равна

$$E_a + \frac{1}{2} m v^2. \quad (5.94)$$

В некоторый момент времени атом переходит в состояние $|b\rangle$, излучая квант с частотой ω' . При этом атом испытывает отдачу, что приводит к изменению его скорости. Теперь энергия атома оказывается равной $E_b + \frac{1}{2} m v'^2$. Согласно закону сохранения энергии имеем

$$\begin{aligned} \hbar \omega' &= \left(E_a + \frac{1}{2} m v^2 \right) - \left(E_b + \frac{1}{2} m v'^2 \right) = \\ &= \hbar \omega + \frac{1}{2} m (v^2 - v'^2). \end{aligned} \quad (5.95)$$

Излученный квант имеет импульс $\hbar \mathbf{k}' = \hbar \omega' \mathbf{k}'/c$. Если импульс системы сохраняется, то

$$m \mathbf{v}' = m \mathbf{v} - \frac{\hbar \omega'}{c} \mathbf{k}'. \quad (5.96)$$

Возводя равенство (5.96) в квадрат и пренебрегая членами порядка $1/c^2$, получим

$$\frac{m v'^2}{2} \approx \frac{m v^2}{2} - \frac{v}{c} \hbar \omega' \cos \vartheta, \quad (5.97)$$

где ϑ — угол между \mathbf{v} и направлением движения излученного кванта. Подставляя это соотношение в выражение (5.95) и разрешая полученное уравнение относительно ω' , находим

$$\omega' = \omega \left(1 + \frac{v}{c} \cos \vartheta \right). \quad (5.98)$$

Это выражение совпадает с нерелятивистским выражением для эффекта Доплера, полученным на основе волновой теории света.

В гл. IV было показано, что в свободном пространстве кванты света ведут себя подобно частицам, обладающим энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\omega/c$. Однако возникает вопрос: имеют ли место законы сохранения энергии и импульса, когда поле взаимодействует с атомом? Для ответа на этот вопрос рассмотрим водородный атом, состоящий из протона с зарядом $+e$, массой m_p и координатами x_p и электрона с зарядом $-e$, массой m_e и координатами x_e . Согласно формуле (5.2) нерелятивистский гамильтониан атома и поля излучения имеет вид

$$H = \frac{p_1^2}{2m_p} + \frac{p_2^2}{2m_e} + eV(|x_p - x_e|) + \sum_{l,\sigma} \hbar\omega_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} - \frac{e}{m_p} (A(x_p) p_1) + \frac{e}{m_e} (A(x_e) p_2). \quad (5.99)$$

Очевидно, что в гамильтониан (5.99) входят два значения векторного потенциала, соответствующие положению протона и положению электрона. Нам необходимо рассмотреть главным образом атомное ядро, так как в основном оно и испытывает отдачу. Эта отдача и позволит объяснить эффект Доплера.

Введем новые переменные. Пусть

$$\xi = \frac{m_p x_p + m_e x_e}{m_p + m_e} \quad (5.100)$$

— координаты центра масс атома и

$$\rho = (x_p - x_e) \quad (5.101)$$

— относительные координаты двух частиц. Обобщенные импульсы, сопряженные переменным ξ и ρ , будут в данном случае выражениями вида

$$p_\xi = M\dot{\xi}, \quad p_\rho = \mu \left(\frac{p_1}{m_p} - \frac{p_2}{m_e} \right), \quad (5.102)$$

где $M = m_p + m_e$ — полная масса атома и $\mu = m_e m_p / M$ — приведенная масса.

Как обычно, предположим, что длина волны излучения велика по сравнению с размерами атома. Тогда в гамильтониане в члене, описывающем взаимодействие, переменные x_p и x_e можно заменить на ξ , т. е. считать поле в атоме постоянным и равным полю в центре масс атома. В этих переменных гамильтониан (5.99) примет вид

$$H = H_0 + H_1, \quad (5.103)$$

где

$$H_0 = \frac{p_\xi^2}{2M} + \frac{p_p^2}{2\mu} + eV(\rho) + \sum_{l, \sigma} \hbar \omega_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma}, \quad (5.104)$$

$$H_1 = -\frac{e}{\mu} (A(\xi) p_p). \quad (5.105)$$

Первый член в H_0 описывает свободную частицу с массой M и импульсом p_ξ , точнее, движение ее центра тяжести. Если мы пользуемся нормировкой по объему полости (см. [4], стр. 66), то собственные функции этого гамильтониана имеют вид

$$L^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} (p'_\xi \xi)\right), \quad (5.106)$$

где p'_ξ — собственные значения оператора импульса. Эти собственные значения дискретны, так как волновые функции должны удовлетворять периодическим граничным условиям на противоположных стенках полости. Собственное значение энергии для этого состояния равно $p'^2_\xi / 2M$.

Следующие два члена в выражении (5.104) описывают движение электрона относительно протона. Энергетические собственные функции для этих членов являются не чем иным, как водородными волновыми функциями. Мы обозначим их через $|n\rangle$, при этом энергия каждого состояния равна E_n . Последний член в гамильтониане (5.104) определяет энергию свободного поля излучения. Собственное состояние поля, соответствующее энергии $n_1 \hbar \omega_1 + \dots + n_l \hbar \omega_l + \dots$, обозначим $|n_1, n_2, \dots, n_l, \dots\rangle$. Таким образом, собственное состояние гамильтониана H_0 можно обозначить

$$|p'_\xi, n, n_1, n_2, \dots\rangle, \quad (5.107)$$

причем этому состоянию соответствует собственное значение энергии

$$\frac{p'_\xi{}^2}{2M} + E_n + n_1 \hbar \omega_1 + \dots + n_l \hbar \omega_l + \dots \quad (5.108)$$

В этом случае уравнения движения для амплитуд вероятностей (5.19) принимают вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc}{dt} (p'_\xi, n, n_1, \dots, n_l, \dots) = \\ = \sum_{p''_\xi, m, m_1, \dots, m_l, \dots} \langle p'_\xi, n, n_1, \dots, n_l, \dots | H_1 | p''_\xi, m, m_1, \dots, m_l, \dots \rangle \times \\ \times c(p''_\xi, m, m_1, \dots, m_l, \dots) e^{i\omega_{ab}t}, \end{aligned} \quad (5.109)$$

где

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{ab} = \left(\frac{p'^2_\xi}{2M} + E_n + n_1 \hbar \omega_1 + \dots + n_l \hbar \omega_l + \dots \right) - \\ - \left(\frac{p''^2_\xi}{2M} + E_m + m_1 \hbar \omega_1 + \dots + m_l \hbar \omega_l + \dots \right), \end{aligned} \quad (5.110)$$

а взаимодействие описывается гамильтонианом

$$\begin{aligned} H_1 = - \frac{e}{\mu} \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_l \epsilon_0 \tau}} [a_{l\sigma} \exp(ik_l \xi) + \\ + a_{l\sigma}^\dagger \exp(-ik_l \xi)] (e_{l\sigma} p_\rho). \end{aligned} \quad (5.111)$$

В результате нетрудно вывести закон сохранения импульса, если вычислить матричные элементы

$$\langle p'_\xi | H_1 | p''_\xi \rangle \sim \frac{1}{L^3} \iiint_0^L d\xi \exp \left[\left(\left(-\frac{i}{\hbar} p'_\xi \pm ik_l + \frac{i}{\hbar} p''_\xi \right) \xi \right) \right]. \quad (5.112)$$

Очевидно, что эти матричные элементы равны нулю всегда, за исключением случая, когда

$$p''_\xi - p'_\xi = \pm \hbar k_l. \quad (5.113)$$

Это равенство и дает как раз закон сохранения импульса системы, состоящей из фотона и атома. Если матричные

элементы H_1 равны нулю, то переходы невозможны. Следовательно, для разрешенных переходов выполняется закон сохранения импульса. Таким образом, закон сохранения импульса содержится и в квантовой теории поля.

После этих рассуждений отличные от нуля матричные элементы гамильтониана H_1 можно записать в виде

$$\begin{aligned} \langle p'_\xi, n, n_1, \dots, n_l, \dots | H_1 | p'_\xi - \hbar k_l, m, n_1, \dots, n_l + 1, \dots \rangle = \\ = -\frac{e}{\mu} \sqrt{\frac{\hbar (n_{l\sigma} + 1)}{2\omega_l \varepsilon_0 \tau}} (e_{l\sigma} p_{\rho nm}), \end{aligned} \quad (5.114a)$$

$$\begin{aligned} \langle p'_\xi, n, n_1, \dots, n_l, \dots | H_1 | p'_\xi + \hbar k_l, m, n_1, \dots, n_l - 1, \dots \rangle = \\ = -\frac{e}{\mu} \sqrt{\frac{\hbar n_{l\sigma}}{2\omega_l \varepsilon_0 \tau}} (e_{l\sigma} p_{\rho nm}), \end{aligned} \quad (5.114b)$$

где согласно (5.49)

$$p_{\rho nm} = \langle n | p_\rho | m \rangle = \frac{i\mu}{\hbar} (E_n - E_m) \langle n | \rho | m \rangle \quad (5.115)$$

(обозначения несколько изменены).

Закон сохранения энергии в такого рода процессах следует как из теории возмущений, так и из приближения Вигнера — Вайскопфа, которое мы использовали в теории естественной ширины линии. Таким образом, объяснение эффекта Доплера содержится и в квантовой теории излучения.

Доплеровское смещение частоты излучения движущегося атома приводит к дополнительному уширению спектральной линии. Это дополнительное уширение можно объяснить следующим образом. Импульсы молекул подчиняются распределению Максвелла. Если газ имеет температуру T , то вероятность того, что молекула имеет импульс в интервале от p'_ξ до $p'_\xi + dp'_\xi$, равна

$$\exp\left(-\frac{p'^2_\xi}{2MkT}\right) dp'_\xi. \quad (5.116)$$

Когда такая молекула излучает фотон с частотой ω' , энергия и импульс системы должны сохраняться. Это налагает определенные ограничения на возможные

значения p'_ξ . Согласно (5.95) имеем

$$\frac{1}{2M} (p'^2_\xi - p''^2_\xi) = \hbar (\omega' - \omega) \quad (5.117)$$

(обозначения (5.95) несколько изменены). С другой стороны, возводя в квадрат соотношение (5.96) и пренебрегая членами порядка $1/c^2$, получим

$$\frac{1}{2M} (p''^2_\xi - p'^2_\xi) \approx \frac{\hbar\omega}{cM} p'_k, \quad (5.118)$$

где p'_k — компонента импульса p'_ξ в направлении излучения. Сравнивая соотношения (5.117) и (5.118), легко видеть, что для того, чтобы определить интенсивность излучения с заданной частотой ω' , компоненту импульса p'_ξ вдоль направления излучения следует считать постоянной. При этом компоненты импульса p'_ξ , нормальные направлению излучения \mathbf{k} , могут принимать любые значения от $-\infty$ до $+\infty$. Таким образом, интенсивность излучения на частоте ω' пропорциональна выражению

$$d\omega'_l \exp\left(-\frac{p_k^2}{2MkT}\right) = \exp\left[-\frac{Mc^2}{2kT} \frac{(\omega'_l - \omega_0)^2}{\omega_0^2}\right] d\omega'_l, \quad (5.119)$$

где $\hbar\omega_0 = E_n - E_m$ и ω'_l — частота излучаемых квантов. Это означает, что форма спектральной линии при доплеровском уширении описывается гауссовым распределением.

Интенсивность излучения также пропорциональна вероятности перехода в единицу времени из начального состояния, состоящего из атома с импульсом p'_ξ , находящегося в возбужденном состоянии $|n\rangle$, в отсутствие квантов, в конечное состояние, когда атом с импульсом p''_ξ находится в состоянии $|m\rangle$ и в системе присутствует один квант. Так как матричные элементы (5.114) не содержат импульса, то интегрирование (5.116) по компонентам импульса p_ξ , перпендикулярным направлению излучения, несущественно.

Ширина линии, описываемой выражением (5.119), определенная по половине максимальной интенсивности,

равна

$$\delta = \omega_0 \sqrt{\frac{2kT}{Mc^2} \ln 2}. \quad (5.120)$$

Несмотря на то, что $kT \ll Mc^2$, доплеровское уширение оказывается гораздо более сильным, чем естественное уширение линии. Однако при частотах ω' , далеких от резонансной частоты ω_0 , линия имеет лоренцевскую форму, соответствующую естественному уширению, в то время как доплеровское уширение при этих частотах несущественно. Это обусловлено более быстрым убыванием на больших расстояниях экспоненты типа e^{-x^2} по сравнению с функцией вида $(1 + x^2)^{-1}$.

5.8. Распространение света в вакууме [24]

В этом разделе мы покажем, как можно применить квантовую теорию к расчету интенсивности света, распространяющегося в свободном пространстве. Кроме того, квантовая теория излучения позволяет показать, и это мы также сделаем в настоящем разделе, каким образом фазовые соотношения между компонентами поля излучения приводят к конечной скорости распространения сигнала в вакууме. Эта задача связана с проблемой передачи и приема в радиосвязи и служит основой для изучения квантовых шумов в соответствующих технических устройствах.

Передатчик мы будем представлять в виде некоторого отдельного атома A , расположенного в начале координат. Пусть в момент времени $t = 0$ атом A находится в возбужденном состоянии. Через некоторый промежуток времени t атом A переходит в основное состояние, излучая фотон. Приемником является другой атом B , расположенный по оси z на расстоянии r от начала координат (рис. 9). Пусть атом B находится сначала в основном состоянии. Фотон, излученный атомом A , может провзаимодействовать с атомом B и перевести последний в возбужденное состояние. Так как излученный фотон распространяется со скоростью c , то поглощение его атомом B может состояться лишь через промежуток времени, равный r/c . Ниже мы покажем, как эти результаты получаются из квантовой теории излучения.

Для упрощения анализа предположим, что среднее время жизни атома A в возбужденном состоянии очень мало, так что можно сказать, что атом A излучает фотон в некоторый определенный момент времени. В этом случае, если $1/\gamma_A$ есть среднее время жизни атома A в возбужденном состоянии, то

величина γ_A велика, и, согласно теории спонтанного излучения, приведенной в разделе 5.5, атом A имеет широкий практически непрерывный спектр излучения. С другой стороны, мы будем считать, что время жизни атома B в возбужденном состоянии достаточно велико (γ_B очень мало), так что атом B поглощает фотоны в очень узком спектральном диапазоне. Для наших целей существенным является то

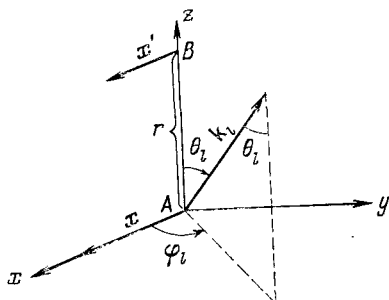


Рис. 9. Атом A возбужден и излучает; атом B поглощает излученный фотон после того, как пройдет время $t > r/c$.

обстоятельство, что, поглотив фотон, атом B сразу оказывается в возбужденном состоянии.

Мы предположим также, что длина волны излучения атома A велика по сравнению с размерами обоих атомов. Это предположение позволит нам применять к обоим атомам соотношения (5.45) и (5.49).

Для простоты будем считать, что дипольные моменты атомов A и B , соответствующие переходам между основным и возбужденным состояниями, параллельны оси x .

Невозмущенный гамильтониан атомов A и B и поля излучения равен

$$H_0 = H_A + H_B + H_r. \quad (5.121)$$

Собственное состояние этого гамильтониана можно записать в виде

$$|E_0\rangle = |n; n'; n_{l\sigma}\rangle. \quad (5.122)$$

Эта запись означает, что атом A находится в состоянии $|n\rangle$, атом B находится в состоянии $|n'\rangle$ и имеется $n_{l\sigma}$ квантов с импульсом $\hbar k_l$, энергией $\hbar\omega_l$ и поляризацией σ .

Состоянию $|E_0\rangle$ соответствует энергия

$$E_0 = E_n + E_{n'} + \hbar\omega_l n_{l\sigma}. \quad (5.123)$$

Если $|n\rangle$ и $|s\rangle$ — состояния атома A , а $|n'\rangle$ и $|s'\rangle$ — состояния атома B , то

$$\hbar\omega_{ns} = E_n - E_s, \quad \hbar\omega'_{n's'} = E_{n'} - E_{s'}. \quad (5.124)$$

В наших новых обозначениях, используя соотношение (5.49), для атомов A и B получим

$$\langle n | p_A | s \rangle = im\omega_{ns} x_{ns}, \quad \langle n' | p_B | s' \rangle = im\omega'_{n's'} x_{n's'}, \quad (5.125)$$

где p_A и p_B — импульсы атомов A и B , а m — масса электрона.

Гамильтониан взаимодействия атомов A и B с полем излучения имеет вид

$$H_1 = -\frac{e}{m} (A(0) p_A) - \frac{e}{m} (A(rk) p_B). \quad (5.126)$$

Потенциал A для атома A берется в начале координат, а для атома B — на расстоянии r от начала координат по оси z . В этом случае потенциал $A(r)$ описывается выражением (5.8). Теперь нетрудно вычислить необходимые для уравнений (5.19) отличные от нуля матричные элементы гамильтониана H_1 , соответствующие переходу между двумя состояниями гамильтониана H_0 .

Систему связанных уравнений (5.19) можно несколько преобразовать с помощью выражений (5.126). Для этого сначала вычислим отличные от нуля матричные элементы гамильтониана H_1 :

$$\begin{aligned} \langle n; n'; n_{l\sigma} | H_1 | s; s'; n_{l\sigma} + 1 \rangle = \\ = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3}} \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{n_{l\sigma} + 1}{\omega_l}} e_{l\sigma} (\langle n | p_A | s \rangle \langle n' | s' \rangle + \\ + \langle n' | e^{ik_l r \cos \theta_l} p_B | s' \rangle \langle n | s \rangle), \quad (5.127) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n; n'; n_{l\sigma} | H_1 | s; s'; n_{l\sigma} - 1 \rangle = \\ = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3}} \sum_{l, \sigma} \sqrt{\frac{n_{l\sigma}}{\omega_l}} e_{l\sigma} (\langle n | p_A | s \rangle \langle n' | s' \rangle + \\ + \langle n' | e^{-ik_l r \cos \theta_l} p_B | s' \rangle \langle n | s \rangle), \quad (5.128) \end{aligned}$$

где θ_l — угол между k_l и осью z . Так как мы предполагаем, что размеры атомов малы по сравнению с длиной волны, то множитель $\exp(\pm ik_l r \cos \theta_l)$ можно вынести из-под знака интеграла, и тогда, используя соотношения (5.125), для матричных элементов можно получить следующие выражения:

$$\begin{aligned} \langle n; n'; n_{l\sigma} | H_1 | s; s'; n_{l\sigma} \pm 1 \rangle = \\ = -ie \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3}} \sum_{l, \sigma} \left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{n_{l\sigma} + 1}{\omega_l}} \\ \sqrt{\frac{n_{l\sigma}}{\omega_l}} \end{array} \right\} e_{l\sigma} (\omega_{ns} \mathcal{X}_{ns} \delta_{n's'} + \\ + e^{\pm ik_l r \cos \theta_l} \omega'_{n's'} \mathcal{X}_{n's'} \delta_{ns}). \quad (5.129) \end{aligned}$$

Первый член в этой сумме соответствует излучению (или поглощению) фотона атомом A при условии, что атом B остается в прежнем состоянии. Второй член соответствует излучению или поглощению фотона атомом B при условии, что атом A остается в прежнем состоянии.

Используя матричные элементы (5.129), перепишем теперь систему связанных уравнений (5.19) в виде

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc}{dt}(n; n'; n_{l\sigma}, t) = \\ = -i \sum_{s, l, \sigma} e \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3 \omega_l}} [\sqrt{n_{l\sigma} + 1} \omega_{ns} (e_{l\sigma} \mathcal{X}_{ns}) \times \\ \times e^{i(\omega_{ns} - \omega_l)t} c(s; n; n_{l\sigma} + 1, t) + \\ + \sqrt{n_{l\sigma}} \omega_{ns} (e_{l\sigma} \mathcal{X}_{ns}) e^{i(\omega_{ns} + \omega_l)t} c(s; n'; n_{l\sigma} - 1, t)] - \\ - i \sum_{n', l, \sigma} e \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 L^3 \omega_l}} (e_{l\sigma} \mathcal{X}_{n's'}) \times \\ \times [\sqrt{n_{l\sigma} + 1} \omega'_{n's'} e^{i(k_l r \cos \theta_l + \omega'_{n's'} - \omega_l)t} \times \\ \times c(n; s'; n_{l\sigma} + 1, t) + \sqrt{n_{l\sigma}} \omega'_{n's'} \times \\ \times e^{-i(k_l r \cos \theta_l - \omega'_{n's'} - \omega_l)t} c(n; s'; n_{l\sigma} - 1, t)]. \quad (5.130) \end{aligned}$$

Для простоты основные состояния атомов A и B обозначим индексом 1, а единственные принимаемые нами во

внимание возбужденные состояния этих атомов обозначим индексом 2 и введем новые обозначения:

$$\begin{aligned} -\omega_{12} = \omega_{21} &\equiv -\omega, & -\omega'_{12} = +\omega'_{21} &= -\omega', \\ x_{21} = x_{12} &= x, & x'_{12} = x'_{21} &= x'. \end{aligned} \quad (5.131)$$

Напомним также прежнее предположение, что векторы x и x' направлены вдоль оси x . В момент $t = 0$ начальное состояние системы описывается кет-вектором $|2; 1; 0; t = 0\rangle$, и, следовательно,

$$c(2; 1; 0; t = 0) = 1, \quad (5.132)$$

а остальные коэффициенты c равны нулю. Задача состоит в том, чтобы найти вероятность того, что состояние системы в момент времени t будет описываться кет-вектором $|1; 2; 0; t\rangle$. При переходе в это состояние атом A должен излучить фотон, а атом B должен этот фотон поглотить. Как известно, эта вероятность имеет вид

$$|c(1; 2; 0; t)|^2. \quad (5.133)$$

Так как атом B находится далеко от атома A и его влияние на спонтанное излучение атома A пренебрежимо мало, то для описания этого спонтанного излучения мы можем использовать результаты раздела 5.6. Предположим, что начальное состояние системы (5.132) распадается по закону

$$c(2; 1; 0; t) = e^{-\gamma_A t/2}, \quad (5.134)$$

где $1/\gamma_A$ — среднее время жизни атома A . Если пренебречь присутствием атома B , то согласно разделу 5.6 решение уравнения (5.130) для $c(1; 1; 1_{l\sigma}; t)$ — имеет вид

$$c(1; 1; 1_{l\sigma}; t) = \frac{e}{\sqrt{2\hbar\epsilon_0 L^3}} \frac{\omega}{\sqrt{\omega_l}} (e_{l\sigma} x) \frac{1}{-i(\omega_l - \omega) + \gamma_A/2} \quad (5.135)$$

для промежутков времени, значительно больших времени, необходимого атому A для того, чтобы с полной определенностью перейти в основное состояние.

Для перехода из состояния $|1; 1; 1_{l\sigma}\rangle$ в конечное состояние $|1; 2; 0\rangle$ матричные элементы x_{11} равны

нулю, и поэтому (5.130) переходит в следующее уравнение:

$$\frac{dc(1; 2; 0; t)}{dt} = - \sum_{l, \sigma} \frac{e}{\sqrt{2\hbar\epsilon_0 L^3}} \frac{\omega'}{\sqrt{\omega_l}} (e_{l\sigma} \mathbf{x}') \times \\ \times e^{i[k_l r \cos \theta_l + (\omega' - \omega_l) t]} c(1; 1; 1_{l\sigma}; t). \quad (5.136)$$

Остальные члены обращаются в нуль, так как предполагается, что у атомов имеется лишь по два уровня. Если приближенное выражение (5.135) подставить в (5.136) и проинтегрировать по времени, то получим

$$c(1; 2; 0; t) = - \frac{e^2 \omega \omega'}{2\hbar\epsilon_0 L^3} \sum_{l, \sigma} \frac{(e_{l\sigma} \mathbf{x}) (e_{l\sigma} \mathbf{x}') e^{ik_l r \cos \theta_l}}{\omega_l [i(\omega - \omega_l) + \gamma_A/2] i(\omega_l - \omega')} \times \\ \times [1 - \exp(-i(\omega_l - \omega') t)], \quad (5.137)$$

где использовано следующее начальное условие: при $t = 0$ $c(1; 2; 0; 0) = 0$. Сумму в выражении (5.137) можно оценить, если перейти к интегралу. Это преобразование длинно и неинтересно. Оно проделано в приложении Ж [24], где показано, что

$$c(1; 2; 0; t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t < \frac{r}{c}, \\ -\frac{1}{r} \frac{e^2 |\mathbf{x}| |\mathbf{x}'| \omega \omega' \mu_0 e^{i\omega' r/c}}{4\pi\hbar [i(\omega - \omega') + \gamma_A/2]} & \text{при } t > \frac{r}{c}. \end{cases} \quad (5.138)$$

Таким образом, вероятность найти атом B в возбужденном состоянии в любой момент времени $t < r/c$, меньший времени, необходимого фотону для того, чтобы достичь атома B , равна нулю. Для $t > r/c$ имеем

$$|c(1; 2; 0; t)|^2 = \frac{1}{r^2} \left(\frac{e^2 |\mathbf{x}| |\mathbf{x}'| \omega \omega' \mu_0}{4\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(\omega - \omega')^2 + (\gamma_A/2)^2}. \quad (5.139)$$

Эта вероятность обратно пропорциональна квадрату расстояния r .

В результате можно сделать вывод, что изложенная теория правильно предсказывает скорость распространения света и дает правильный закон убывания интенсивности света с расстоянием от источника.

Как и раньше, мы видим, что линия излучения имеет характерную лоренцевскую форму.

5.9. Полуклассическая теория электронного спинового резонанса

Теория электронного и ядерного спиновых резонансов имеет много общего с теорией двухуровневого мазера, так как в обоих этих случаях исследуется взаимодействие излучения с двухуровневой квантовой системой. Мы довольно полно исследуем взаимодействие магнитного дипольного момента (спин $1/2$), находящегося в постоянном магнитном поле, с высокочастотным магнитным полем, так как это взаимодействие играет важную роль в современных исследованиях. Случай взаимодействия электрического дипольного момента (важный для аммиачного мазера) с высокочастотным электрическим полем формально ничем не отличается от случая взаимодействия магнитного диполя с высокочастотным магнитным полем и может быть описан в рамках той же теории.

В настоящем разделе высокочастотное магнитное поле будет рассматриваться классически. Это означает, что мы пренебрежем обратным влиянием спина на поле [30]. В разделе 5.11 мы проквантуем поле излучения и учтем влияние спина на поле. Эта простая проблема может быть решена полностью.

Гамильтониан магнитного диполя μ , находящегося в магнитном поле \mathbf{H} , имеет вид

$$H = - (\mu \mathbf{H}). \quad (5.140)$$

Для электрона со спиновым моментом $1/2 \hbar$ магнитный момент равен

$$\mu = - \frac{\gamma \hbar}{2} \sigma, \quad (5.141)$$

где γ — гиромагнитное отношение, а $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — спиновые операторы, введенные в разделах 2.6 и 3.8. Выберем магнитное поле \mathbf{H} в виде

$$\mathbf{H} = (H_1 \cos \omega t, H_1 \sin \omega t, H_0), \quad (5.142)$$

где H_0 — постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси z , и H_1 — высокочастотное циркулярно поляризованное поле. Тогда, используя соотношения (5.140) и (5.141),

приходим к гамильтониану вида

$$H = \frac{\gamma\hbar}{2} [H_0\sigma_z + H_1(\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t)]. \quad (5.143)$$

Если σ_x и σ_y выразить через σ_+ и σ_- (см. (2.79)), то гамильтониан H можно привести к виду

$$H = \frac{\gamma\hbar}{2} [H_0\sigma_z + H_1(\sigma_+e^{-i\omega t} + \sigma_-e^{i\omega t})]. \quad (5.144)$$

Уравнение Шредингера

$$H |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (5.145)$$

с таким гамильтонианом может быть решено точно. Если $H_1 = 0$, то согласно разделу 2.6 собственные значения оператора σ_z равны ± 1 и соответствуют стационарным состояниям $|\pm 1\rangle$. Таким образом, собственные значения энергии невозмущенного гамильтониана равны

$$E_{\pm} = \pm \frac{\hbar\omega_0}{2}, \quad (5.146)$$

где

$$\omega_0 = \gamma H_0. \quad (5.147)$$

Общее решение уравнения (5.145) при $H_1 = 0$ согласно разделу 2.8 имеет следующий вид:

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-i\omega_0 t/2} | + 1 \rangle + c_2 e^{i\omega_0 t/2} | - 1 \rangle, \quad (5.148)$$

где $|c_1|^2$ — вероятность того, что величина σ_z находится в состоянии $| + 1 \rangle$, и $|c_2|^2$ — вероятность того, что эта величина находится в состоянии $| - 1 \rangle$. Условие нормировки на единицу требует, чтобы выполнялось равенство

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (5.149)$$

Используя соотношения (2.97), (2.100) и соотношения ортогональности, можно показать, что для $|\psi(t)\rangle$, определяемого формулой (5.148), имеют место равенства

$$\begin{aligned} \langle \sigma_x \rangle &= c_1^* c_2 e^{i\omega_0 t} + c_1 c_2^* e^{-i\omega_0 t}, \\ \langle \sigma_y \rangle &= -i (c_1^* c_2 e^{i\omega_0 t} - c_1 c_2^* e^{-i\omega_0 t}), \\ \langle \sigma_z \rangle &= |c_1|^2 - |c_2|^2, \\ \langle \sigma_+ \rangle &= c_1^* c_2 e^{i\omega_0 t}, \\ \langle \sigma_- \rangle &= c_1 c_2^* e^{-i\omega_0 t}. \end{aligned} \quad (5.150)$$

Таким образом, ожидаемое значение σ_z постоянно, а σ_x и σ_y прецессируют вокруг оси z и при этом $\langle \sigma_x \rangle^2 + \langle \sigma_y \rangle^2 = 4|c_1|^2|c_2|^2$.

Если $H_1 \neq 0$, то H_1 мы можем рассматривать как возмущение, вызывающее переходы между состояниями $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$. Однако с помощью простого преобразования можно прямо получить решение уравнения (5.144). Пусть

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t \sigma_z/2} |\chi(t)\rangle. \quad (5.151)$$

Это преобразование не является преобразованием к представлению взаимодействия. Подставляя формулу (5.151) в уравнение (5.145), в котором H определяется с помощью (5.144), получим следующее уравнение для $|\chi(t)\rangle$:

$$i \frac{\partial |\chi(t)\rangle}{\partial t} = \frac{1}{2} \{(\omega_0 - \omega) \sigma_z + \gamma H_1 [e^{-i\omega t} \sigma_+(t) + e^{i\omega t} \sigma_-(t)]\} \times |\chi(t)\rangle, \quad (5.152)$$

где

$$\sigma_{\pm}(t) = e^{i\omega t \sigma_z/2} \sigma_{\pm} e^{-i\omega t \sigma_z/2}. \quad (5.153)$$

Согласно теореме 13 гл. III (см. (3.169)) при $\xi = i\omega t$ имеем

$$\sigma_{\pm}(t) = \sigma_{\pm} e^{\pm i\omega t}. \quad (5.154)$$

Подставляя это соотношение в уравнение (5.152), приходим к уравнению, не содержащему явной зависимости от времени:

$$i \frac{\partial |\chi(t)\rangle}{\partial t} = \frac{1}{2} [(\omega_0 - \omega) \sigma_z + \gamma H_1 (\sigma_+ + \sigma_-)] |\chi(t)\rangle. \quad (5.155)$$

В этом уравнении операторы σ_{\pm} и σ_z соответствуют шредингеровскому представлению. Если бы мы воспользовались представлением взаимодействия, то гамильтониан зависел бы от времени явно. Теперь можно сразу найти решение уравнения (5.155). Для этого введем обозначения

$$\Omega \cos \theta = \omega_0 - \omega, \quad \Omega \sin \theta = \gamma H_1, \quad (5.156)$$

где

$$\Omega^2 = (\omega_0 - \omega)^2 + (\gamma H_1)^2,$$

и воспользуемся соотношением (2.79). Тогда формальное решение уравнения (5.155) имеет вид

$$|\chi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i\Omega t}{2}(\cos\theta\sigma_z + \sin\theta\sigma_x)\right)|\psi(0)\rangle. \quad (5.157)$$

Воспользуемся теоремой 14 гл. III (см. (3.178)), в которой положим $\xi = -\frac{1}{2}i\Omega t \cos\theta$ и $\eta = -\frac{1}{2}i\Omega t \sin\theta$. Тогда для $|\psi(t)\rangle$ получим выражение

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} \left[\cos\frac{\Omega t}{2} - i\sin\frac{\Omega t}{2}(\cos\theta\sigma_z + \sin\theta\sigma_x) \right] |\psi(0)\rangle \equiv U(t, 0)|\psi(0)\rangle. \quad (5.158)$$

Это выражение определяет полное решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (5.144).

Так как состояния $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$ представляют собой полную систему, то функцию $|\psi(t)\rangle$ можно разложить по этой полной системе функций точно так же, как это было сделано в (5.148). Однако теперь коэффициенты c_1 и c_2 будут функциями t . Таким образом, величины

$$|c_1(t)|^2 = |\langle +1 | \psi(t) \rangle|^2, \quad |c_2(t)|^2 = |\langle -1 | \psi(t) \rangle|^2 \quad (5.159)$$

дают вероятности обнаружения спина в момент t соответственно в состояниях $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$.

Пусть, например, первоначально система находится в состоянии $|\psi(0)\rangle = |+1\rangle$. Воспользовавшись соотношениями (2.97), (2.100) и (5.158), легко получаем

$$|c_2(t)|^2 = \sin^2\theta \sin^2\frac{\Omega t}{2}. \quad (5.160)$$

Эта величина дает вероятность того, что спин, находившийся при $t=0$ в состоянии $|+1\rangle$, будет в момент времени t в состоянии $|-1\rangle$. Подставляя вместо θ и Ω их значения (5.156), получим

$$|c_2(t)|^2 = \frac{(\gamma H_1)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma H_1)^2} \sin^2\left(\frac{t}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma H_1)^2}\right). \quad (5.161)$$

Вероятность $|c_1(t)|^2$ определяется из условия нормировки

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2. \quad (5.162)$$

Если первоначально система находилась в состоянии $| -1 \rangle$, то вероятность обнаружить систему в момент времени t в состоянии $| +1 \rangle$ также дается выражением (5.161). Поэтому вероятности излучения и поглощения фотонов равны друг другу.

Вероятность перехода (5.161) приближается к единице лишь вблизи резонанса, т. е. в том случае, когда частота приложенного поля равна $\omega = \omega_0 = \gamma H_0$. Вдали от резонанса вероятность перехода, вызванного высокочастотным полем, пренебрежимо мала.

Прежде чем закончить этот раздел, рассмотрим временную зависимость $\sigma_{\pm}(t)$ и $\sigma_z(t)$. Для этих операторов можно написать гейзенберговские уравнения или воспользоваться соотношениями

$$\sigma_{\pm}^H(t) = U^{-1}(t, 0) \sigma_{\pm}^S U(t, 0), \quad (5.163)$$

$$\sigma_z^H(t) = U^{-1}(t, 0) \sigma_z^S U(t, 0),$$

где $U(t, 0)$ — унитарный оператор, определяемый соотношением (5.158). Используя результаты раздела 2.8, можно получить эти операторы в гейзенберговском представлении. В порядке упражнения покажите, что

$$\sigma_z(t) = (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta \cos \Omega t) \sigma_z + (\sin \theta \sin \Omega t) \sigma_y + (\sin 2\theta \sin^2 \Omega t / 2) \sigma_x. \quad (5.164)$$

Если при $t = 0$ $|\psi(0)\rangle = | +1 \rangle$, то согласно (5.158), (2.97) и (2.100) имеем

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i \frac{\omega t}{2}} \left(\cos \frac{\Omega t}{2} - i \sin \frac{\Omega t}{2} \cos \theta \right) | +1 \rangle - i e^{i \frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\Omega t}{2} \sin \theta | -1 \rangle. \quad (5.165)$$

Таким образом, ожидаемые значения операторов $\sigma_{\pm}(t)$ и $\sigma_z(t)$ равны соответственно

$$\langle \psi(t) | \sigma_{\pm} | \psi(t) \rangle = \mp i e^{\pm i \omega t} \sin \frac{\Omega t}{2} \sin \theta \left(\cos \frac{\Omega t}{2} \pm \pm i \sin \frac{\Omega t}{2} \cos \theta \right), \quad (5.166)$$

$$\langle \psi(t) | \sigma_z | \psi(t) \rangle = \cos^2 \frac{\Omega t}{2} + \sin^2 \frac{\Omega t}{2} \cos 2\theta.$$

При резонансе, когда $\omega = \omega_0$, $\theta = \pi/2$, $\Omega = \gamma H_1$, из (5.166) следует, что

$$\begin{aligned}\langle \sigma_x \rangle &= \sin \omega_0 t \sin (\gamma H_1 t), \\ \langle \sigma_y \rangle &= -\cos \omega_0 t \sin (\gamma H_1 t), \\ \langle \sigma_z \rangle &= \cos (\gamma H_1 t).\end{aligned}\quad (5.167)$$

Таким образом, $\langle \sigma_x \rangle$ и $\langle \sigma_y \rangle$ прецессируют вокруг H_0 с частотой ω_0 , а $\langle \sigma_z \rangle$ колеблется с частотой γH_1 . В соответствии с принципом Эренфеста эти результаты согласуются с классическим поведением магнитного момента в постоянном магнитном поле и перпендикулярном ему высокочастотном циркулярно поляризованном магнитном поле. Если $H_1 \ll H_0$, то спин может совершить много оборотов вокруг направления поля H_0 , прежде чем значительно изменится величина $\langle \sigma_z \rangle$.

5.10. Влияние соударений на уширение линий двухуровневой спиновой системы

В предыдущем разделе мы предполагали, что взаимодействие спина с полем продолжается бесконечно долго. В газе при отличной от абсолютного нуля температуре имеют место хаотические соударения между молекулами, которые прерывают взаимодействие спина с полем. Этот эффект оказывается весьма важным в газовых оптических квантовых генераторах, ибо он приводит к уширению спектральной линии. Мы уже изучили два механизма уширения спектральной линии: естественное уширение линии и доплеровское уширение. Теперь рассмотрим соударения.

Если соударений нет, то между спинами и полем имеет место обмен энергией. Мгновенное значение потока мощности при таком обмене равно

$$P(t) = \hbar \omega_0 \frac{d}{dt} |c_2(t)|^2, \quad (5.168)$$

где $|c_2(t)|^2$ определяется соотношением (5.161).

Предположим теперь, что имеют место соударения. Тогда вероятность того, что за время t не произойдет соударение, равна $\exp(-t/T_2)$, где T_2 — среднее время

между соударениями. Вероятность же того, что последнее соударение произошло в интервале времени от t до $t + dt$, равна

$$\frac{dt}{T_2} e^{-t/T_2}.$$

Таким образом, средняя мощность переноса энергии от поля к спином или обратно равна

$$\bar{P} = \hbar\omega_0 \int_0^{\infty} \frac{d}{dt} |c_2(t)|^2 e^{-t/T_2} \frac{dt}{T_2},$$

или согласно (5.161)

$$\bar{P} = \frac{\hbar\omega_0 (\gamma H_1)^2}{T_2} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma H_1)^2 + (1/T_2)^2}. \quad (5.169)$$

Таким образом, в результате уширения из-за столкновений линия спинового резонанса приобретает лоренцевскую форму.

5.11. Спиновый резонанс в квантованном поле [30]

В разделе 5.9 мы рассмотрели поведение частицы со спином $1/2$, взаимодействующей с классическим полем излучения, при условии, что обратным действием частицы на поле пренебрегается.

Сейчас мы рассмотрим ту же проблему, но при условии, что поле является квантованным и учитывается обратное влияние спина на поле.

Рассмотрим небольшой образец, содержащий частицы со спином $1/2$ и расположенный в таком месте резонансной полости, где магнитное поле данного типа колебаний имеет лишь одну компоненту, а именно направлено вдоль оси x .

Как показано в гл. IV, энергия этого типа колебаний поля равна

$$H_{\text{field}} = \hbar\omega a^\dagger a, \quad (5.170)$$

где ω — частота данного типа колебаний.

Согласно формулам (5.140) и (5.141) энергия взаимодействия имеет вид

$$H_{\text{int}} = \int_{\tau} \frac{\gamma \hbar}{2} (\sigma H) d\tau = \gamma H_0 \frac{\hbar}{2} \sigma_z + \frac{\gamma \hbar}{2} \int_{\tau} \sigma_x H_x d\tau, \quad (5.171)$$

где H_0 — величина постоянного магнитного поля, направленного вдоль оси z , H_x — высокочастотное поле в образце, τ — объем образца. Если воспользоваться соотношениями (4.55) и (4.76) и считать образец малым, то из выражения (5.171) следует, что

$$H_{\text{int}} = \frac{\omega_0 \hbar}{2} \sigma_z + \hbar k (a + a^+) \sigma_x, \quad (5.172)$$

где k — малая величина, в которую вошли все множители перед оператором σ_x в выражении (5.171), которых нет в формуле (5.172).

Так как в силу (2.79) $\sigma_x = \sigma_+ + \sigma_-$, то мы можем сложить выражения (5.170) и (5.172) и записать полный гамильтониан в виде

$$H = \hbar \omega a^+ a + \frac{\hbar \omega_0}{2} \sigma_z + \hbar k (a + a^+) (\sigma_+ + \sigma_-). \quad (5.173)$$

Этот гамильтониан можно упростить следующим образом. Когда $k = 0$, т. е. когда отсутствует высокочастотное поле, то временная зависимость гейзенберговских операторов имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} a(t) &= a(0) e^{-i\omega t}, & \sigma_+(t) &= \sigma_+(0) e^{i\omega_0 t}, \\ a^+(t) &= a^+(0) e^{i\omega t}, & \sigma_-(t) &= \sigma_-(0) e^{-i\omega_0 t}. \end{aligned} \quad (5.174)$$

Следовательно, вблизи резонанса ($\omega \approx \omega_0$) члены $a\sigma_+$ и $a^+\sigma_-$ в выражении (5.173) остаются практически все время постоянными, в то время как члены $a\sigma_-$ и $a^+\sigma_+$ быстро меняются с частотами $\pm (\omega + \omega_0)$. Для не очень больших интервалов времени, которые нас только и интересуют, быстро осциллирующие члены можно в среднем приравнять нулю. Тогда гамильтониан (5.173) с

хорошим приближением оказывается равным

$$H = \hbar\omega a^+a + 1/2\hbar\omega_0\sigma_z + \hbar k(a^+\sigma_- + a\sigma_+). \quad (5.175)$$

Как известно, линейно поляризованное высокочастотное поле можно разложить на две — право- и левоциркулярно поляризованные — компоненты. Приближение (5.175) эквивалентно учету лишь той компоненты, которая вращается в ту же сторону, что и спин. При небольших амплитудах высокочастотных полей ошибка оказывается незначительной.

Гамильтониан (5.175) эрмитов и учитывает как влияние спина на поле, так и влияние поля на спин.

Теперь задача заключается в решении уравнения Шредингера с гамильтонианом вида (5.175). Здесь мы приводим решение, принадлежащее Джейнсу и Каммингсу [30].

Для удобства вычислений введем два новых оператора:

$$S_+ = \sigma_+a, \quad S_- = \sigma_-a^+. \quad (5.176)$$

В порядке упражнения предлагается, исходя из коммутационных соотношений (2.80) и $[a, a^+] = 1$, доказать справедливость следующих коммутационных соотношений для операторов S_{\pm} :

$$\begin{aligned} [a^+a, S_{\pm}] &= \mp S_{\pm}, \quad [\sigma_z, S_{\pm}] = \pm 2S_{\pm}, \\ [S_+, S_-] &= \frac{1 + \sigma_z}{2} + a^+a\sigma_z. \end{aligned} \quad (5.177)$$

В дальнейшем будет показано, что гейзенберговские уравнения движения для этих операторов оказываются нелинейными. Два первых интеграла этих уравнений можно найти, не решая их. Проверкой можно убедиться, что операторы

$$C_1 = \omega \left(a^+a + \frac{\sigma_z}{2} \right), \quad C_2 = k(S_+ + S_-) - \frac{\Delta\omega}{2}\sigma_z, \quad (5.178)$$

где $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, коммутируют с гамильтонианом (5.175) и потому являются интегралами движения. Из выражений (5.178), (5.176) и (5.175) следует, что

$$H = \hbar(C_1 + C_2). \quad (5.179)$$

Таким образом, C_1 и C_2 не зависят от H . Используя соотношения коммутации (5.177), можно показать, что

$$[C_1, C_2] = 0, \quad (5.180)$$

и, следовательно, операторы C_1 и C_2 по отношению друг к другу можно считать c -числами.

Если взаимодействие спинов и поля излучения отсутствует, то имеется полная система базисных векторов: состояния поля излучения $|n\rangle$, удовлетворяющие условию $a^+a|n\rangle = n|n\rangle$, и состояния спина $|\pm 1\rangle$, для которых $\sigma_z|\pm 1\rangle = \pm|\pm 1\rangle$. Эту систему векторов можно использовать в качестве базисной системы для разложения вектора состояния в интересующей нас задаче. Нетрудно видеть, что

$$\begin{aligned} C_1|n, \pm 1\rangle &\equiv \omega(a^+a + \frac{1}{2}\sigma_z)|n, \pm 1\rangle = \\ &= \omega(n \pm 1/2)|n, \pm 1\rangle. \end{aligned} \quad (5.181)$$

Таким образом, оператор C_1 имеет собственные значения $\omega(n \pm 1/2)$ и собственные векторы $|n, \pm 1\rangle$, и, следовательно, этот оператор диагонален в этом представлении. Оператор C_2 не диагонален в этом представлении. Но в силу коммутативности операторов C_1 и C_2 можно найти такое представление, в котором оба оператора диагональные (см. [2]). Для этого в качестве базисных векторов следует взять некоторые линейные комбинации собственных векторов оператора C_1 . Если операторы C_1 и C_2 будут приведены к диагональному виду, то согласно формуле (5.179) гамильтониан H будет также представлен в диагональном виде, и поэтому соответствующее представление можно назвать энергетическим. Если гамильтониан диагонализирован, то тем самым решено и уравнение Шредингера.

Хотя мы можем взять произвольную линейную комбинацию собственных векторов оператора C_1 , мы выберем некоторую специальную простую линейную комбинацию и проверим, может ли она быть собственным вектором оператора C_2 (или оператора H). Рассмотрим для этого следующие векторы состояний:

$$\begin{aligned} |\varphi(n, 1)\rangle &= \cos \theta_n |n+1, -1\rangle + \sin \theta_n |n, +1\rangle, \\ |\varphi(n, 2)\rangle &= -\sin \theta_n |n+1, -1\rangle + \cos \theta_n |n, +1\rangle, \end{aligned} \quad (5.182)$$

где состояние $|n+1, -1\rangle$ соответствует наличию $n+1$ квантов поля и спину, ориентированному вниз, а состояние $|n, +1\rangle$ соответствует наличию n квантов поля и спину, ориентированному вверх. При этом одно из состояний системы, $|0, -1\rangle$, оказывается не включенным в выбранный нами набор состояний — это состояние, в котором отсутствуют кванты, а спин ориентирован вниз. Это состояние мы рассмотрим отдельно и будем называть его основным состоянием. Угол θ_n представляет собой свободный параметр, выбираемый так, чтобы векторы $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$ были собственными векторами оператора C_2 . Число n изменяется от 0 до ∞ .

Предварительно заметим, что

$$\begin{aligned} \langle \varphi(n, 1) | \varphi(n, 2) \rangle &= 0, \\ \langle \varphi(n, 1) | \varphi(n, 1) \rangle &= \langle \varphi(n, 2) | \varphi(n, 2) \rangle = 1. \end{aligned} \quad (5.183)$$

Оба состояния (5.182) ортогональны основному состоянию $|0, -1\rangle$. Кроме того, в соответствии с соотношениями (5.181) имеем

$$\begin{aligned} C_1 |\varphi(n, 1)\rangle &= \omega(n + 1/2) |\varphi(n, 1)\rangle, \\ C_1 |\varphi(n, 2)\rangle &= \omega(n + 1/2) |\varphi(n, 2)\rangle, \\ C_1 |0, -1\rangle &= -\frac{\omega}{2} |0, -1\rangle, \end{aligned} \quad (5.184)$$

так что при любом выборе параметра θ_n состояния $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$ представляют собой вырожденные состояния оператора C_1 *).

Поддействуем теперь оператором C_2 на векторы $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$.

Легко получить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} C_2 |\varphi(n, 1)\rangle &= (k\sqrt{n+1} \sin \theta_n + 1/2 \Delta \omega \cos \theta_n) |n+1, -1\rangle + \\ &+ (k\sqrt{n+1} \cos \theta_n - 1/2 \Delta \omega \sin \theta_n) |n, +1\rangle, \end{aligned} \quad (5.185)$$

$$\begin{aligned} C_2 |\varphi(n, 2)\rangle &= (k\sqrt{n+1} \cos \theta_n - 1/2 \Delta \omega \sin \theta_n) |n+1, -1\rangle - \\ &- (k\sqrt{n+1} \sin \theta_n + 1/2 \Delta \omega \cos \theta_n) |n, +1\rangle. \end{aligned} \quad (5.186)$$

* Состояния $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$ различны, но собственные значения C_1 одинаковы.

При выводе (5.185) и (5.186) мы воспользовались равенствами

$$\begin{aligned} S_+ |n+1, -1\rangle &= \sqrt{n+1} |n, +1\rangle, \\ S_+ |n, +1\rangle &= 0, \\ S_- |n+1, -1\rangle &= 0, \\ S_- |n, +1\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1, -1\rangle. \end{aligned} \quad (5.187)$$

Для того чтобы векторы $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$ были собственными векторами оператора C_2 , нужно, чтобы

$$\begin{aligned} C_2 |\varphi(n, 1)\rangle &= \lambda_n |\varphi(n, 1)\rangle, \\ C_2 |\varphi(n, 2)\rangle &= \lambda'_n |\varphi(n, 2)\rangle. \end{aligned} \quad (5.188)$$

Сопоставляя выражения (5.185), (5.186) и соотношения (5.188), можно видеть, что при

$$\operatorname{tg} \theta_n = \frac{k \sqrt{n+1}}{1/2 \Delta \omega + \lambda_n} \quad \text{и} \quad \lambda_n = + \sqrt{(1/2 \Delta \omega)^2 + k^2 (n+1)} \quad (5.189)$$

векторы $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$ будут собственными векторами для оператора C_2 с собственными значениями $\pm \lambda_n$.

Иными словами, $\lambda'_n = -\lambda_n$. Тогда с помощью простых тригонометрических преобразований можно получить

$$\operatorname{tg} 2\theta_n = \frac{2 \operatorname{tg} \theta_n}{1 - \operatorname{tg}^2 \theta_n} = \frac{2k \sqrt{n+1}}{\Delta \omega}. \quad (5.190)$$

Для основного состояния $|0, -1\rangle$ имеем

$$C_2 |0, -1\rangle = \frac{\Delta \omega}{2} |0, -1\rangle, \quad (5.191)$$

и, следовательно, оно также является собственным состоянием оператора C_2 .

Таким образом, мы нашли собственные значения гамильтониана H , ибо согласно выражениям (5.179), (5.184) и (5.188) имеем

$$\begin{aligned} H |\varphi(n, 1)\rangle &= \hbar[\omega(n+1/2) + \lambda_n] |\varphi(n, 1)\rangle, \\ H |\varphi(n, 2)\rangle &= \hbar[\omega(n+1/2) - \lambda_n] |\varphi(n, 2)\rangle \end{aligned} \quad (5.192a)$$

и для основного состояния

$$H|0, -1\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|0, -1\rangle. \quad (5.192b)$$

Интересно, что собственные состояния гамильтониана H являются линейными комбинациями собственных состояний невозмущенного гамильтониана H_0 .

Полезно иметь выражения состояний $|n, \pm 1\rangle$ невозмущенного гамильтониана H_0 через состояния $|\varphi(n, 1)\rangle$ и $|\varphi(n, 2)\rangle$. Из соотношений (5.182) и (5.183) следует, что

$$|n+1, -1\rangle = \cos \theta_n |\varphi(n, 1)\rangle - \sin \theta_n |\varphi(n, 2)\rangle, \quad (5.193)$$

$$|n, +1\rangle = \sin \theta_n |\varphi(n, 1)\rangle + \cos \theta_n |\varphi(n, 2)\rangle$$

и

$$\langle n+1, -1 | \varphi(n, 1)\rangle = \cos \theta_n = \langle n, +1 | \varphi(n, 2)\rangle, \quad (5.194)$$

$$\langle n, +1 | \varphi(n, 1)\rangle = \sin \theta_n = -\langle n+1, -1 | \varphi(n, 2)\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots, \infty).$$

Вычислим теперь вероятность перехода между начальным состоянием ($|n, +1\rangle$), в котором имеется n квантов и спин, ориентированный вверх, и конечным состоянием ($|n+1, -1\rangle$), в котором имеется $n+1$ квантов, а спин ориентирован вниз, и сравним результаты с результатами раздела 5.9.

Так как гамильтониан (5.175) явно не содержит времени, то решение уравнения Шредингера можно записать в виде

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|\psi(0)\rangle, \quad (5.195)$$

где в рассматриваемом случае $|\psi(0)\rangle = |n, +1\rangle$. Вероятность обнаружить в момент t $n+1$ квантов и спин, ориентированный вниз, равна $|\langle n+1, -1 | \psi(t)\rangle|^2$. Используя (5.192a), (5.189) и (5.190), получаем для этой вероятности выражение

$$\begin{aligned} & |\langle n+1, -1 | \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) |n, +1\rangle|^2 = \sin^2 2\theta_n \sin^2 \lambda_n t = \\ & = \frac{4k^2(n+1)}{(\Delta\omega)^2 + 4k^2(n+1)} \sin^2\left(\frac{t}{2} \sqrt{(\Delta\omega)^2 + 4k^2(n+1)}\right). \end{aligned} \quad (5.196)$$

С другой стороны, эта вероятность равна вероятности перехода из состояния $|n+1, -1\rangle$ в состояние $|n, +1\rangle$.

Сравнивая этот результат с выражением (5.161) для случая неквантованного поля, видим, что обе вероятности очень похожи. Квадрат амплитуды высокочастотного поля H_1^2 в формуле (5.161) пропорционален числу квантов поля n . Разница состоит в том, что выражение (5.196) содержит спонтанное излучение. Его учет привел к тому, что везде n заменялось на $(n+1)$. Таким образом, даже если $n=0$, спин может опрокинуться и излучить квант, который потом может быть снова поглощен. Джейнс и Каммингс [30] показали, что если при полуклассическом рассмотрении учесть обратное влияние спина на поле излучения, то спонтанное излучение возникает и в полуклассической теории.

ЗАДАЧИ

5.1. Гамильтониан электрона в кулоновском поле в одноэлектронном атоме имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} p^2 - \frac{Ze^2}{r},$$

где использованы обычные обозначения. Напишите гейзенберговские уравнения движения для $\mathbf{p}_H(t)$ и $\mathbf{x}_H(t)$. Предположите, что \mathbf{x} и \mathbf{p} подчиняются коммутационным соотношениям вида $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$).

5.2. Выведите золотое правило Ферми в том случае, когда конечные состояния дискретно, а начальные состояния образуют непрерывный спектр.

5.3. Оцените индуцированный дипольный момент (5.51) атомного водорода, соответствующий переходам между $1s$ - и $2s$ -состояниями и между $1s$ - и $2p$ -состояниями. Волновые функции можно найти в любой книге по квантовой механике.

5.4. Полная интенсивность излучения изотропного источника может быть получена интегрированием выражения (5.59) по всем телесным углам и умножением полученного выражения на 2. Таким образом, получаем $I_0 = \bar{n}\hbar\omega^3/\pi^2c^2$, где \bar{n} — среднее число излученных квантов. Вычислите отношение w_{abs} в (5.63) к w_{sp} в (5.69). При каких условиях это отношение может равняться единице?

5.5. Если система двухуровневых атомов с энергиями E_a и E_b находится в тепловом равновесии с тепловым резервуаром при температуре T , то число атомов в состоянии $|a\rangle$ пропорционально $\exp(-E_a/kT)$, а число атомов в состоянии $|b\rangle$ пропорционально $\exp(-E_b/kT)$, где k — больцмановская постоянная. Покажите, что если атомы находятся в тепловом равновесии с излучением, то

среднее число квантов определяется планковским распределением

$$\bar{n} = \left[\exp \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right) - 1 \right]^{-1},$$

где $\hbar\omega = E_a - E_b$. У к а з а н и е: воспользуйтесь результатами задачи 5.4.

5.6. Вычислите естественную ширину спектральной линии атомарного водорода, соответствующую переходу $2p - 1s$. Сравните результат с наблюдаемой шириной линии.

5.7. Вычислите доплеровскую ширину спектральной линии атомарного водорода, соответствующую переходу $2p - 1s$. Водород находится при комнатной температуре.

5.8. Решите гейзенберговские уравнения движения для операторов спина $\sigma_{\pm}(t)$ и $\sigma_z(t)$, пользуясь гамильтонианом (5.144). Выразите полученный результат через операторы $\sigma_{\pm}(0)$ и $\sigma_z(0)$. У к а з а н и е: сделайте подстановку $\sigma_{\pm}(t) = S_{\pm}(t) \exp(\pm i\omega t)$.

5.9. Проверьте соотношение (5.180).

5.10. Найдите гейзенберговские уравнения движения для операторов $a^{\dagger}a$, σ_z и S_{\pm} , используя гамильтониан (5.175). Из этих уравнений выведите два интеграла движения (5.178). Исключите из этих уравнений операторы $a^{\dagger}a$ и S_{\pm} и получите уравнение только для σ_z . Один из интегралов этого уравнения очевиден. На основе этого интеграла покажите, что оператор σ_z содержит эллиптические функции.

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

6.1. Введение

Необходимость применения статистических методов возникает в квантовой механике по тем же причинам, что и в классической механике, а именно из-за недостатка информации об изучаемой системе. Обычно система имеет так много степеней свободы, что физически невозможно проделать необходимое число измерений для того, чтобы полностью определить состояние системы. Для предсказания результатов измерений, производимых над системой, о которой известно очень мало, должны быть использованы статистические методы, требующие введения понятия ансамбля. Ансамбль — это совокупность систем, тождественных по своим свойствам с изучаемой системой. Если задана некоторая информация о системе, например ее средняя энергия, то тогда каждая система ансамбля будет иметь точно такую же среднюю энергию. Остальные, неизвестные, параметры этой системы отыскиваются для различных систем этого ансамбля с помощью некоторого метода, который будет обсужден позднее. Понятие ансамбля является полезным потому, что средние значения физических величин по ансамблю равны истинному значению рассматриваемой физической величины для изучаемой системы.

Как мы уже видели ранее, вероятностная интерпретация волновой функции приводит к появлению дополнительных статистических свойств в квантовой механике. Даже в том случае, когда известно, что система находится в состоянии $|\psi\rangle$, в силу достаточно большого числа измерений, проделанных над системой для определения состояния $|\psi\rangle$, мы все же можем говорить только о том, что

некоторое измерение величины A будет давать величину a с вероятностью $|\langle a | \psi \rangle|^2$, где $A |a\rangle = a |a\rangle$. В этом случае необходимость в статистическом описании системы возникает не в силу некоторого недостатка информации о состоянии системы, а скорее из-за фундаментальной природы возмущения, вызванного самим процессом измерения. Такие статистические свойства отсутствуют в классических системах.

Мы уже могли убедиться в полезности введения ансамблей в квантовой механике. Если состояние изучаемой системы описывается волновой функцией или, что то же самое, вектором состояния $|\psi\rangle$, то по определению система находится в данном случае в чистом состоянии. Это означает, что мы обладаем полной информацией о системе, которая допускается квантовой механикой. Если оператор A представляет наблюдаемую величину, то среднее значение оператора A равно

$$\langle A \rangle_{\psi} = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (6.1)$$

Для получения этого среднего значения мы берем большое число одинаковых систем, каждая из которых приготовлена одинаковым образом в состоянии $|\psi\rangle$, и измеряем величину A для каждой системы ансамбля. Эти измерения усредняются и должны совпадать с выражением (6.1). Следовательно, мы уже имели дело с ансамблями, ибо все квантовые средние значения — это средние значения по некоторым ансамблям. Если система находится в чистом состоянии (оно изображается вполне определенной волновой функцией или вектором состояния), то каждый элемент статистического ансамбля находится в том же состоянии.

С другой стороны, если не было проведено необходимого количества измерений для установления того факта, что система находится в состоянии $|\psi\rangle$, то тогда имеется недостаток информации о состоянии системы, которую можно было бы в принципе получить. В связи с этими соображениями, если состояние системы не известно с достаточной полнотой и определенностью, то система, по определению, находится в смешанном состоянии. В этом случае должен быть сформирован ансамбль из таких систем, которые находятся в различных возможных

состояниях, «взвешенных» в соответствии с той частичной информацией о состоянии системы, которую мы в состоянии получить. Если известно, что p_ψ — вероятность того, что система находится в состоянии $|\psi\rangle$, то тогда среднее значение оператора A равно

$$\langle A \rangle = \sum_{\psi} p_{\psi} \langle A \rangle_{\psi} = \sum_{\psi} p_{\psi} \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad (6.2)$$

где мы положили $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Сумма вычисляется по всем возможным состояниям $|\psi\rangle$ системы. Величины p_{ψ} являются вероятностями, или весовыми факторами, и поэтому удовлетворяют соотношению

$$\sum_{\psi} p_{\psi} = 1. \quad (6.3)$$

Напомним, что когда состояние системы известно не полностью (смешанное состояние), то ансамбль формируется так же, как и в случае, когда состояние системы задано полностью (чистое состояние); просто в первом случае различные члены ансамбля «взвешены» в соответствии с некоторым распределением вероятностей. Метод определения весовых факторов будет обсужден позднее.

Для облегчения вычислений средних по некоторому ансамблю фон Нейманом [31, 32, 9] была введена матрица плотности, или статистический оператор. Этот же вопрос детально обсуждается и в книге Толмена [33]. В последние годы во многих областях физики наметились новые важные применения матрицы плотности. Обзоры Фано [34] и Тер-Хаара [35] дают некоторое представление о том, как широка область применения статистического оператора. В данной главе мы дадим краткое введение в этот вопрос и некоторые применения статистического оператора.

В следующих двух разделах мы определим статистический оператор и установим некоторые его свойства. В разделе 6.4 мы выведем уравнение движения для этого оператора; оно описывает эволюцию статистической «смеси» с течением времени в отсутствие возмущений, вызываемых измерением. В разделе 6.5 будут обсуждаться чистые и смешанные состояния квантовых систем, а связь между матрицей плотности и энтропией будет ус-

тановлена в разделе 6.6. Это позволит нам дать метод определения статистического оператора, исходя из данной информации о системе. В разделе 6.7 мы вычислим матрицу плотности для ансамбля частиц со спином $1/2$. В этом случае мы будем считать каждую частицу одним элементом ансамбля, что обычно принято делать, когда имеют дело с большим числом одинаковых частиц. В следующем разделе мы определим квантовую характеристическую функцию для ансамбля систем и покажем, каким образом эта функция может быть использована для изучения статистических свойств квантовых систем, находящихся как в чистых, так и в смешанных состояниях.

Разделы 6.9 и 6.11 будут посвящены изучению некоторых свойств электромагнитных полей, имеющих пуассоновское и экспоненциальное (или гауссово) распределение вероятностей нахождения фотонов по заданным разрешенным для них состояниям.

В гл. IV мы уже видели, что сигнал генератора образует распределение Пуассона по модам резонатора. Здесь мы снова обсудим этот вопрос. Эти результаты полезны для изучения квантовых шумов в линейных усилителях. В разделе 6.12 мы рассчитаем энтропию некоторых ансамблей.

6.2. Статистический оператор

Для описания системы, вероятность нахождения которой в состоянии $|\psi\rangle$ равна p_ψ , вводится оператор

$$\rho = \sum_{\psi} |\psi\rangle p_{\psi} \langle\psi|. \quad (6.4)$$

Такой ансамбль описывает статистическую «смесь», в которой информация об определенном состоянии системы является не совсем полной. Состояние $|\psi\rangle$ является одним из возможных состояний системы, а величина p_ψ определяет вероятность того, что система находится в любом из состояний $|\psi\rangle$. Для удобства мы предположим, что $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, но различные состояния $|\psi\rangle$, вообще говоря, не являются ортогональными. Поскольку величины p_ψ определяют вероятности различных состояний $|\psi\rangle$, то

очевидно, что они должны удовлетворять условию

$$p_{\psi} \geq 0, \quad \sum_{\psi} p_{\psi} = 1. \quad (6.5)$$

Величина ρ , определяемая равенством (6.4), называется статистическим оператором; она описывает ансамбль квантовых систем.

Поскольку величина ρ является оператором, то этот оператор всегда можно задать в матричном представлении. Рассмотрим в качестве простого примера ансамбль гармонических осцилляторов. Мы можем выбрать в качестве базисных векторов собственные состояния оператора энергии $\{|n\rangle\}$ и записать оператор (6.4) в этом представлении:

$$\langle n|\rho|n'\rangle = \sum_{\psi} \langle n|\psi\rangle p_{\psi} \langle \psi|n'\rangle. \quad (6.6)$$

Обычно эту величину и называют матрицей плотности.

Рассмотрим свойства статистического оператора ρ . Во-первых, заметим, что след оператора ρ равен единице, т. е.

$$\text{Sp } \rho = 1. \quad (6.7)$$

Это следует из определения (6.4) и условия (6.5). Действительно, если мы возьмем след от обеих частей равенства (6.4) и воспользуемся соотношением (6.5), то получим

$$\text{Sp } \rho = \text{Sp } \sum_{\psi} |\psi\rangle p_{\psi} \langle \psi| \equiv \sum_{\psi} p_{\psi} \langle \psi|\psi\rangle = 1,$$

ибо $\langle \psi|\psi\rangle = 1$. При этом мы воспользовались соотношением

$$\text{Sp } |\psi\rangle \langle \varphi| \equiv \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle \varphi|n\rangle = \sum_n \langle \varphi|n\rangle \langle n|\psi\rangle = \langle \varphi|\psi\rangle, \quad (6.8)$$

которое вытекает из того, что след может быть вычислен в любом представлении, если выбранная система базисных векторов состояния $\{|n\rangle\}$ является полной.

Далее покажем, что если A — наблюдаемая величина, то ее среднее значение равно

$$\langle A \rangle = \text{Sp } \rho A. \quad (6.9)$$

Для этого используем соотношения (6.4) и (6.9) и получим, что

$$\langle A \rangle = \text{Sp} \left(\sum_{\psi} |\psi\rangle p_{\psi} \langle \psi| A \right) = \sum_{\psi} p_{\psi} \langle \psi| A | \psi \rangle.$$

Это выражение в точности совпадает с определением (6.2). При доказательстве было использовано соотношение (6.8) с $\langle \varphi | = \langle \psi | A$. В силу этого мы можем с помощью статистического оператора (6.4) рассчитывать не только средние по ансамблю от наблюдаемых, но и средние значения от функции наблюдаемых, т. е.

$$\langle f(A) \rangle = \text{Sp} \rho f(A). \quad (6.10)$$

В одном из следующих разделов будет рассмотрен статистический оператор для чистого состояния.

6.3. Некоторые свойства статистического оператора

Статистический оператор ρ , определенный формулой (6.4), является эрмитовым положительно определенным оператором, а его след равен единице. Для того чтобы показать это, образуем оператор, эрмитово сопряженный оператору (6.4). В силу вещественности и положительности статистических весов p_{ψ} получим, что

$$\rho^{\dagger} = \left(\sum_{\psi} p_{\psi} |\psi\rangle \langle \psi| \right)^{\dagger} = \sum_{\psi} p_{\psi} |\psi\rangle \langle \psi| = \rho. \quad (6.11)$$

Следовательно, оператор ρ эрмитов. Раньше мы уже показали, что $\text{Sp} \rho = 1$. Для того чтобы показать, что оператор ρ является положительно определенным оператором, рассмотрим произвольный кет-вектор $|\chi\rangle$. С помощью формулы (6.4) мы можем образовать следующее выражение:

$$\langle \chi | \rho | \chi \rangle = \sum_{\psi} p_{\psi} \langle \chi | \psi \rangle \langle \psi | \chi \rangle = \sum_{\psi} p_{\psi} |\langle \psi | \chi \rangle|^2 \geq 0. \quad (6.12)$$

Неравенство (6.12) следует из того, что вероятности p_{ψ} являются вещественными и положительными величинами. Так как след оператора ρ равен единице, то все диагональные матричные элементы этого оператора в любом представлении должны быть вещественными числами и находиться в интервале между нулем и единицей.

Можно также показать, что любой положительно определенный эрмитов оператор, след которого равен единице, можно рассматривать как статистический оператор, представляющий некоторый ансамбль. При этом такой оператор всегда можно записать в виде (6.4).

Прежде чем переходить к доказательству этого утверждения, выведем ряд соотношений. Из общей теории матриц известно, что любой эрмитов оператор может быть диагонализирован (т. е. приведен к диагональному виду) с помощью некоторого унитарного преобразования. Таким образом, если S есть матрица преобразования от одного представления к другому (см. раздел 1.10) и при этом

$$S^+ = S^{-1}, \quad (6.13)$$

то тогда S можно выбрать так, чтобы удовлетворялось уравнение

$$S\rho S^+ = \rho', \quad (6.14)$$

где ρ' — искомая диагональная матрица. Если мы вычислим след от обеих частей равенства (6.14), то получим

$$\text{Sp } S\rho S^+ = \text{Sp } \rho S S^+ = \text{Sp } \rho = 1 = \text{Sp } \rho'. \quad (6.15)$$

Здесь мы использовали равенство (6.13), а также тот факт, что если след существует, то $\text{Sp } ABC = \text{Sp } BCA$. Следовательно, след является инвариантом относительно любого унитарного преобразования. В диагональном представлении диагональные матричные элементы оператора ρ' равны ρ'_n . Они вещественны и удовлетворяют следующим условиям:

$$\sum_n \rho'_n = 1, \quad 0 \leq \rho'_n \leq 1. \quad (6.16)$$

Эти числа являются собственными значениями статистического оператора.

В силу этого, если ρ' — положительно определенный эрмитов оператор, след которого равен единице, то этот оператор в диагональном представлении (при $|n\rangle = S|\psi\rangle$) имеет вид

$$\rho' = \sum_n \rho'_n |n\rangle \langle n|, \quad (6.17)$$

где ρ' — невырожденные собственные значения. Векторы состояния $\{|n\rangle\}$ образуют полную ортогональную систему. Так как след оператора ρ равен единице, то

$$\sum_n \rho'_n = 1.$$

Поскольку собственные значения оператора ρ вещественны и положительны, то они ограничены неравенством

$$0 \leq \rho'_n \leq 1.$$

Таким образом, величины ρ'_n подчиняются тем же условиям, которым должны удовлетворять статистические веса, а это значит, что оператор ρ' можно рассматривать как статистический оператор, описывающий смесь состояний $|n\rangle$, каждое из которых обладает весом ρ'_n . Именно это мы и хотели доказать.

Следующее свойство статистического оператора определяется соотношением

$$\text{Sp } \rho^2 \leq 1. \quad (6.18)$$

Действительно, в силу того, что след является инвариантом унитарного преобразования, мы можем записать

$$\text{Sp } \rho^2 = \text{Sp } \rho'^2 = \sum_n \rho_n'^2 \leq \left(\sum_n \rho_n' \right)^2 = (\text{Sp } \rho')^2 = 1,$$

и неравенство (6.18) доказано. В процессе доказательства мы использовали соотношения (6.16).

6.4. Уравнение движения для оператора ρ

Если известно, что в момент времени $t = t_0$ состояние квантовой системы описывается вектором $|\psi(t_0)\rangle$, то в момент t оно определяется следующим образом (см. (1.200)):

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (6.19)$$

при условии, что в течение интервала времени $t - t_0$ система не возмущается измерением. При этом оператор U удовлетворяет уравнению (1.202):

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = H U, \quad (6.20)$$

и условию (1.203):

$$U(t_0, t_0) = I. \quad (6.21)$$

Теперь предположим, что мы не имеем полной информации о состоянии системы в момент времени t_0 . Рассмотрим ансамбль систем. Как отмечалось ранее, элементы ансамбля взвешены с вероятностями p_ψ . Эти вероятности не изменяются с течением времени, так как за время $t - t_0$ над ансамблем не производятся никакие измерения и, следовательно, не приобретает никакая новая информация о системе. В силу этого статистический оператор ρ в момент t , в соответствии с законом причинности, будет определяться развитием во времени его значения в начальный момент времени t_0 :

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \sum_{\psi} p_{\psi} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = \sum_{\psi} p_{\psi} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \times \\ &\times \langle \psi(t_0)| U^{\dagger}(t, t_0) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^{\dagger}(t, t_0), \end{aligned} \quad (6.22)$$

где $\rho(t_0)$ — начальное значение статистического оператора:

$$\rho(t_0) = \sum_{\psi} p_{\psi} |\psi(t_0)\rangle \langle \psi(t_0)|. \quad (6.23)$$

Для получения (6.23) мы использовали выражение (6.19) и сопряженное ему, а также соотношение унитарности $U^{\dagger} = U^{-1}$. Из выражения (6.22) видно, что развитие во времени оператора ρ для статистической смеси состояний описывается унитарным преобразованием.

Для того чтобы вывести уравнение движения для оператора $\rho(t)$, продифференцируем обе части выражения (6.22) и используем уравнение (6.20) и ему сопряженное. Тогда получим, что

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho(t)]. \quad (6.24)$$

Следует отметить, что мы работаем в представлении Шредингера. В этом представлении оператор $\rho(t)$ зависит от времени в отличие от большинства других наблюдаемых величин, которые в представлении Шредингера не зависят от времени.

Теперь можно легко получить среднее по ансамблю значение наблюдаемой величины A в любой момент времени t , ибо зависимость от времени этого среднего значения определяется зависимостью от времени оператора $\rho(t)$. В шредингеровском представлении среднее значение наблюдаемой $A_S(t)$ в момент времени t есть

$$\langle A_S(t) \rangle = \sum_{\psi} p_{\psi} \langle \psi_S(t) | A_S(t_0) | \psi_S(t) \rangle = \text{Sp } \rho_S(t) A_S(t_0), \quad (6.25)$$

где индекс S означает, что все величины даны в представлении Шредингера. Выражение (6.25) можно записать также с помощью (6.22) в представлении Гейзенберга следующим образом:

$$\langle A \rangle = \text{Sp } \rho(t) A(t_0) = \text{Sp } U \rho(t_0) U^{\dagger} A(t_0) = \text{Sp } \rho_H(t_0) A_H(t), \quad (6.26)$$

где индекс H означает, что все величины даны в представлении Гейзенберга, и

$$A_H(t) = U^{\dagger}(t, t_0) A_S(t_0) U(t, t_0). \quad (6.27)$$

Это равенство соответствует обычному закону преобразования операторов от одного представления к другому. Особенно следует подчеркнуть различие между выражениями (6.27) и (6.22). При выводе формулы (6.26) мы использовали соотношение $\text{Sp } AB = \text{Sp } BA$, предполагая, что соответствующие следы существуют.

Из выражения (6.26) видно, что средние по ансамблю могут быть вычислены как в шредингеровском, так и в гейзенберговском представлениях. Однако результат, естественно, не зависит от вида представления, в котором проводились вычисления. В некоторых случаях при вычислениях значительно удобнее использовать одно представление вместо другого. В дальнейшем во многих случаях представление Гейзенберга окажется более удобным, чем все другие представления.

В качестве примера, заслуживающего упоминания, мы рассмотрим один очень простой частный случай, когда гамильтониан H не зависит явно от времени. В этом случае оператор $U(t, t_0)$ имеет вид

$$U(t, t_0) = \exp \left[\frac{iH(t - t_0)}{\hbar} \right].$$

В энергетическом представлении, когда

$$H | E_n \rangle = E_n | E_n \rangle,$$

статистический оператор записывается в виде

$$\begin{aligned} \langle E_n | \rho(t) | E_{n'} \rangle &= \\ &= \langle E_n | \exp \left[\frac{iH(t-t_0)}{\hbar} \right] \rho(t_0) \exp \left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar} \right] | E_{n'} \rangle = \\ &= \exp \left[\frac{i(E_n - E_{n'})(t-t_0)}{\hbar} \right] \langle E_n | \rho(t_0) | E_{n'} \rangle. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Очевидно, что в использованном выше энергетическом представлении развитие оператора $\rho(t)$ с течением времени сводится только к изменению фазы.

6.5. Чистое состояние

До сих пор мы рассматривали главным образом статистические смеси. Они описывают такое состояние квантовой системы, о котором мы не имеем полной информации, совместимой с квантовыми ограничениями. Если состояние системы известно точно, то тогда система находится в чистом состоянии, например состоянии $|\psi\rangle$. В этом случае можно с полной определенностью сказать, что $p_\psi = 1$, а для всех других состояний $|\psi'\rangle$ вероятности $p_{\psi'}$ равны нулю. Следовательно, статистический оператор (6.4) для чистого состояния приводится к виду

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (6.29)$$

Отсюда сразу вытекает, что

$$\rho_\psi^2 = \rho_\psi, \quad (6.30)$$

ибо $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. Кроме того,

$$\text{Sp } \rho_\psi = \langle\psi|\psi\rangle = 1, \quad \text{Sp } \rho_\psi^2 = 1. \quad (6.31)$$

В разделе 6.3 мы показали, что для смешанного состояния $\text{Sp } \rho^2 < 1$.

Можно также доказать обратное: если $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, то оператор ρ описывает чистое состояние.

Таким образом, необходимым и достаточным условием того, чтобы статистический оператор описывал чистое

состояние, является условие

$$\text{Sp } \rho^2 = 1. \quad (6.32)$$

Отсюда следует, что оператор ρ является эрмитовым и положительно определенным оператором и что $\text{Sp } \rho = 1$. Доказательство этого утверждения оставляем читателю в качестве упражнения.

Среднее значение A для случая ансамбля, представляющего чистые состояния, оказывается равным

$$\langle A \rangle = \text{Sp } \rho A = \sum_{\psi'} p_{\psi'} \langle \psi' | A | \psi' \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle, \quad (6.33)$$

так как $p_{\psi'} = \delta_{\psi'\psi}$. Таким образом, в том случае, когда известно, что система находится в определенном состоянии $|\psi\rangle$, среднее по ансамблю сводится к обычному среднему по квантовому ансамблю. Именно поэтому статистический оператор оказывается полезным при вычислении средних по ансамблю и в случае, когда имеется полная информация о системе, и в том случае, когда информация не является полной. Следует снова подчеркнуть, что квантовые средние — это средние по ансамблю.

6.6. Энтропия

В классической статистической механике энтропия ансамбля систем определяется с помощью соотношения вида

$$S = -k \sum_i p_i \ln p_i, \quad (6.34a)$$

где k — постоянная Больцмана и p_i — вероятность того, что система находится в состоянии i . Величины p_i удовлетворяют условиям

$$\sum_i p_i = 1, \quad 0 \leq p_i \leq 1, \quad p_i = p_i^*. \quad (6.35a)$$

Физически энтропию можно представить себе как меру недостатка информации о системе. Если мы знаем, что система находится в определенном состоянии i , то тогда $p_i = \delta_{ii}$, и мы видим из формулы (6.34a), что энтропия

равна нулю. В этом случае мы обладаем полной информацией о системе, а состояние системы полностью определено.

С другой стороны, если мы ничего не знаем о системе, то это означает, что мы можем с одинаковой вероятностью обнаружить любое ее возможное состояние, необходимо только, чтобы выполнялось условие $\sum_l p_l = 1$. Мы покажем, что в этом случае энтропия максимальна. Для этого найдем максимум функции S при условии, что $\sum_l p_l = 1$. Этот максимум мы будем искать методом неопределенных множителей Лагранжа. Для этого проварьируем энтропию S по p_l :

$$\delta S = -k \sum_l (1 + \ln p_l) \delta p_l = 0, \quad (6.34b)$$

и из условия $\delta S = 0$ найдем максимум. Одновременно с этим проварьируем дополнительное условие $\sum_l p_l = 1$ и получим

$$\sum_l \delta p_l = 0. \quad (6.35b)$$

Воспользуемся методом неопределенных множителей Лагранжа: умножим равенство (6.35b) на неопределенный параметр λ и сложим с равенством (6.34b). Тогда получим

$$\sum_l (1 + \ln p_l + \lambda) \delta p_l = 0.$$

Теперь каждая из вариаций δp_l независима, и последнее уравнение будет удовлетворено тогда и только тогда, когда каждый член равен нулю, т. е.

$$\ln p_l = - (1 + \lambda).$$

Отсюда следует, что величина p_l не зависит от состояния системы l , т. е. систему с одинаковой вероятностью можно найти в любом из ее состояний. В этом случае мы не обладаем никакой информацией о состоянии системы.

Именно поэтому энтропия является мерой недостатка информации о состояниях элементов системы, как это и было определено выше. Это положение является исходным пунктом теории связи Шэннона [36]. В свое время Джейнс [37, 38] предложил использовать понятие энтропии как фундаментальный постулат статистической механики.

В квантовой статистике энтропия определяется через матрицу плотности следующим образом:

$$S = -k \text{Sp } \rho \ln \rho \quad (6.36a)$$

при дополнительном условии

$$\text{Sp } \rho = 1. \quad (6.37)$$

Для определения энтропии необходимо вычислить след оператора $\rho \ln \rho$. Пусть совокупность векторов состояний $\{ |n\rangle \}$ является полной и ортонормированной. Тогда выражение (6.36a) приобретает вид

$$S = -k \sum_{n,m} \langle n | \rho | m \rangle \langle m | \ln \rho | n \rangle. \quad (6.36b)$$

Если мы перейдем с помощью некоторого унитарного преобразования (см. формулу (6.14), в которой матрицу преобразования S не следует путать с энтропией) от представления $\{ |n\rangle \}$ к представлению $\{ |\alpha\rangle \}$, в котором ρ диагонально, то тогда выражение (6.36b) приводится к виду

$$S = -k \sum_{\alpha} p_{\alpha} \ln p_{\alpha}, \quad (6.36c)$$

где $p_{\alpha} = \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle$.

Теперь возникает вопрос: каким образом найти матрицу плотности, которая так детально обсуждалась нами ранее? Мы знаем, что и в квантовом случае энтропия (6.36) — это мера недостатка информации о состояниях элементов ансамбля. Если мы, как и в классическом случае, вычислим максимум S при дополнительном условии (6.37), то найдем, что

$$\sum (1 + \ln \rho + \lambda) \delta \rho = 0, \quad (6.38)$$

или

$$\rho = \text{const.}$$

Это означает, что энтропия максимальна в том случае, когда одинаковы вероятности найти систему в любом из ее возможных состояний. С другой стороны, если система находится в чистом состоянии $|\psi\rangle$, то $S = 0$, так как $\rho_\psi = \delta_{\psi\psi}$.

Предположим теперь, что мы кое-что знаем о системе, например ее среднюю энергию

$$\langle E \rangle = \text{Sp } \rho H, \quad (6.39)$$

где H — гамильтониан системы. Эти сведения о системе должны быть отражены в выборе статистического оператора, описывающего данный ансамбль. Мы можем рассматривать их как дополнительное условие и выбрать ρ так, чтобы энтропия была опять максимальна, но уже при дополнительных условиях (6.37) и (6.39) одновременно. Тогда, если мы проварьируем по ρ выражения (6.36а), (6.37) и (6.39), то получим

$$\text{Sp}(1 + \ln \rho)\delta\rho = 0, \quad \text{Sp } \delta\rho = 0, \quad \text{Sp } H \delta\rho = 0.$$

Если мы теперь умножим соответственно второе и третье уравнения на неопределенные множители λ и β и сложим с первым, то получим

$$\text{Sp}(1 + \lambda + \ln \rho + \beta H)\delta\rho = 0.$$

Так как $\delta\rho$ произвольно и все вариации теперь независимы, то это уравнение будет удовлетворяться только в том случае, когда

$$\ln \rho = -1 - \lambda - \beta H,$$

или

$$\rho = e^{-(1+\lambda)} e^{-\beta H}. \quad (6.40)$$

Мы можем определить λ следующим образом. Возьмем след от обеих частей выражения (6.40) и с помощью (6.37) найдем

$$e^{1+\lambda} = \text{Sp } e^{-\beta H} \equiv Z.$$

Тогда выражение (6.40) приобретет вид

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Sp } e^{-\beta H}} \equiv \frac{e^{-\beta H}}{Z}, \quad (6.41)$$

где величина Z называется статистической суммой. Для того чтобы определить параметр β , мы используем условие (6.39). Тогда получим

$$\langle E \rangle = \frac{\text{Sp } H e^{-\beta H}}{\text{Sp } e^{-\beta H}} \equiv - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z. \quad (6.42)$$

Отсюда мы можем, в принципе, определить параметр β через среднюю энергию системы.

В качестве специального примера рассмотрим полость, заполненную электромагнитным излучением, находящимся в тепловом равновесии со стенками, температура которых равна T .

Средняя энергия, которая содержится в одной моде резонатора при частоте ω , равна $\bar{n} \hbar \omega$, где \bar{n} — среднее число квантов частоты ω внутри полости. Так как гамильтониан для этой моды равен

$$H = \hbar \omega a^+ a,$$

то из формулы (6.42) получим, что

$$\bar{n} \hbar \omega = \langle E \rangle = \frac{\hbar \omega \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | a^+ a x^{-a^+ a} | n \rangle}{\sum_{m=0}^{\infty} \langle m | x^{-a^+ a} | m \rangle}, \quad (6.43)$$

где

$$x = \exp(\beta \hbar \omega) \quad (6.44)$$

и $a^+ a | n \rangle = n | n \rangle$. Мы записали следы в формуле (6.42) в $\{ | n \rangle \}$ -представлении.

Вычисление сумм в выражении (6.43) нетрудно довести до конца. Для среднего числа квантов в моде получается следующее выражение:

$$\bar{n} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n x^{-n}}{\sum_{m=0}^{\infty} x^{-m}} = \frac{1}{x-1} \equiv \frac{1}{\exp(\hbar \omega \beta) - 1} = \frac{\langle E \rangle}{\hbar \omega}. \quad (6.45)$$

Отсюда можно найти β через \bar{n} . Однако из принципа соответствия известно, что при $\hbar \rightarrow 0$ энергия E должна

переходить в среднюю классическую энергию, содержащуюся в выбранной моде резонатора, т. е. при $\hbar \rightarrow 0$ $E \rightarrow kT$, так как из классической теоремы о равномерном распределении энергии по степеням свободы мы получаем $^{1/2} kT$ на каждую степень свободы. Поэтому в пределе при $\hbar \rightarrow 0$ из выражения (6.45) мы получаем

$$\langle E \rangle \rightarrow kT \rightarrow \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega\beta} = \frac{1}{\beta},$$

так что

$$\beta = \frac{1}{kT}. \quad (6.46)$$

Статистический оператор (6.41), который максимизирует энтропию при дополнительных условиях (6.37) и (6.39), т. е. при $\text{Sp } \rho = 1$ и $\text{Sp } \rho H = \langle E \rangle = kT$, имеет поэтому вид

$$\rho = \frac{\exp(-H/kT)}{\text{Sp } \exp(-H/kT)}. \quad (6.47)$$

Можно считать, что этот статистический оператор описывает ансамбль гармонических осцилляторов, который находится в термодинамическом равновесии с тепловым резервуаром при температуре T . Так как оператор ρ зависит только от H , то, следовательно, $[H, \rho(H)] = 0$, и в силу (6.24) оператор ρ не зависит явно от времени в состоянии теплового равновесия.

В энергетическом представлении, когда $H |E_n\rangle = E_n |E_n\rangle$, матричные элементы оператора ρ вида (6.47) определяются следующим образом:

$$\langle E_n | \rho | E_m \rangle = \frac{e^{-\beta E_m} \langle E_n | E_m \rangle}{\sum_{E_m} e^{-\beta E_m}}. \quad (6.48)$$

Вероятность найти систему в состоянии E_m (или найти один элемент ансамбля в состоянии E_m) равна поэтому

$$p_m = \frac{e^{-\beta E_m}}{\sum_{E_m} e^{-\beta E_m}}. \quad (6.49)$$

(Это есть не что иное, как диагональный матричный

элемент оператора ρ в энергетическом представлении.) Распределение (6.49) соответствует распределению вероятностей по Максвеллу — Больцману. Таким образом, в энергетическом представлении мы можем записать статистический оператор ρ следующим образом:

$$\rho = \sum_{E_m} |E_m\rangle p_m \langle E_m|, \quad (6.50)$$

где величина p_m определяется формулой (6.49). Видно, что

$$\text{Sp } \rho^2 = \sum_{E_m} p_m^2 \neq 1, \quad (6.51)$$

так что данный ансамбль описывает смешанное состояние. Иными словами, информации только о средней энергии системы еще недостаточно для полного определения ее состояния.

Максимальная энтропия для ансамбля (6.50) равна

$$\begin{aligned} S_{\max} &= -k \text{Sp } \rho \ln \rho = \\ &= -k \text{Sp} \left(\frac{e^{-\beta H}}{Z} \right) \ln \frac{e^{-\beta H}}{Z} = \frac{E}{T} + k \ln Z, \end{aligned} \quad (6.52)$$

где

$$Z = \text{Sp } e^{-\beta H} = \sum_m e^{-\beta E_m} \quad (6.53)$$

— статистическая сумма, а

$$\langle E \rangle = \text{Sp } \rho H = \sum_m \frac{E_m e^{-\beta E_m}}{Z}. \quad (6.54)$$

Статистическая сумма Z определяет термодинамические свойства системы.

Мы хотим снова подчеркнуть, что когда известна только средняя энергия, то ансамбль все равно может состоять из большого числа элементов, каждый из которых находится в одном из состояний, например состоянии $|E_m\rangle$, статистический вес которого p_m определяется формулой (6.49).

6.7. Матрица плотности для частиц со спином $1/2$ [39]

В некоторых случаях, когда для описания экспериментов достаточно только нескольких параметров системы, матрица плотности может быть выражена прямо через измеренные значения этих параметров [34, 35, 39]. В принципе это можно сделать всегда, но практически — только тогда, когда система описывается лишь несколькими степенями свободы. Один из таких случаев — это вопрос о поляризации пучка электронов или электронов в твердом теле, когда для эксперимента основной интерес представляет только значение спина, а не характеристики пространственного движения электрона.

В гл. II и III мы ввели спиновые операторы Паули для частиц со спином $1/2$. Было найдено, что полная система базисных векторов состояний может быть получена из собственных векторов оператора σ_z . В этом разделе мы прежде всего покажем, как статистический оператор для частиц со спином $1/2$ может быть выражен через измеренные средние значения компонент спина. Мы используем статистический оператор для того, чтобы рассчитать эти ожидаемые значения спина, находящегося в магнитном поле. Будут получены уравнения движения для спиновых операторов, которые окажутся связанными с классическими уравнениями для намагниченности магнитного образца. Таким образом, мы еще на одном примере продемонстрируем применение теоремы Эренфеста.

Рассмотрим ансамбль частиц со спином $1/2$. Ожидаемые значения трех компонент спина (т. е. средние по ансамблю) определяются следующим образом (см. (6.26)):

$$\mathbf{s} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \text{Sp} [\rho_S(t) \boldsymbol{\sigma}_S] = \text{Sp} \{ \rho_H(t_0) \boldsymbol{\sigma}_H(t) \}, \quad (6.55)$$

где $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ — компоненты оператора спина, а ρ — матрица плотности, описывающая ансамбль спинов *). В выражении (6.55) мы можем использовать либо представление Гейзенберга, либо представление Шредингера.

Все спины могут находиться в определенном известном состоянии. В этом случае состояние системы спинов является чистым и каждый элемент ансамбля находится в

*) Читатель не должен путать \mathbf{s} в (6.55) со спиновым оператором $\mathbf{s} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$.

этом состоянии. Если же состояние спинов неизвестно, то ансамбль спинов находится в смешанном состоянии.

Покажем теперь, что измерения величин s_x , s_y , s_z вполне достаточно для полного определения состояния системы, т. е. мы можем выразить ρ через эти компоненты; а это значит, что полученное состояние будет соответствовать чистому состоянию, когда известны s_x , s_y и s_z .

Так как спин 1/2 имеет две проекции на выделенное направление, то система таких спинов может быть описана двухрядной матрицей плотности. В то же время любая двухрядная матрица может быть представлена с помощью трех матриц Паули σ_i и одной двухрядной единичной матрицы I . Следовательно, матрица плотности для ансамбля частиц со спином 1/2 всегда может быть записана в следующей форме:

$$\rho = c_0 I + c_1 \sigma_x + c_2 \sigma_y + c_3 \sigma_z, \quad (6.56)$$

где I — четырехкомпонентная единичная матрица:

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (6.57)$$

а спиновые матрицы Паули в σ_z -представлении имеют вид

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (6.58)$$

Постоянные c_0 , c_1 , c_2 и c_3 определяются следующим образом. Мы знаем, что если ρ — матрица плотности, то $\text{Sp } \rho = 1$. Вычислив след от обеих частей равенства (6.56), получим

$$\text{Sp } \rho = 1 = 2c_0,$$

так как $\text{Sp } \sigma_i = 0$. Отсюда следует, что $c_0 = 1/2$. Умножим теперь обе части равенства (6.56) справа на σ_x и вычислим след обеих частей полученного выражения. Как мы знаем из гл. II и III, $\text{Sp } \sigma_i \sigma_j = 2\delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$). Поэтому

$$s_x = \text{Sp } \rho \sigma_x = 2c_1.$$

Таким образом, $c_1 = 1/2 s_x$, где s_x — среднее по ансамблю от σ_x . Аналогичным образом, если мы умножим последо-

вательно обе части выражения (6.56) на σ_y и σ_z и вычислим след, то получим

$$s_y = 2c_2, \quad s_z = 2c_3.$$

Если подставить эти выражения для c_1 , c_2 и c_3 в (6.56) и использовать для матриц Паули представление (6.58), то получим матрицу плотности в виде

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + s_z & s_x - is_y \\ s_x + is_y & 1 - s_z \end{bmatrix}. \quad (6.59)$$

Следовательно, если известны все три компоненты спинов системы s_x , s_y и s_z , то матрица плотности определена полностью. Тер-Хаар [35] назвал такой подход к матрице плотности операционным подходом в противоположность статистическому подходу, использованному ранее в этой главе.

Запишем теперь оператор ρ в произвольном представлении. Для этого подставим в выражение (6.56) вычисленные ранее величины c . Тогда получим, что

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \sigma_x s_x + \sigma_y s_y + \sigma_z s_z) \equiv \frac{1}{2} (I + (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s})). \quad (6.60)$$

Рассмотрим теперь простой частный случай. Предположим, что все спины находятся в чистом состоянии, например в состоянии $|+1\rangle$, по определению

$$\sigma_z | +1 \rangle = +1 | +1 \rangle. \quad (6.61)$$

Согласно (6.4) оператор ρ для этого чистого состояния имеет вид

$$\rho = | +1 \rangle \langle +1 |, \quad (6.62)$$

и на основе условий ортогональности и нормировки (см. гл. II и III)

$$\langle +1 | +1 \rangle = \langle -1 | -1 \rangle = 1, \quad (6.63)$$

$$\langle +1 | -1 \rangle = \langle -1 | +1 \rangle = 0$$

его можно представить в следующем виде:

$$\rho = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.64)$$

Это выражение полностью согласуется с представлением (6.59), так как для состояния $|+1\rangle$ средние значения компонент спина соответственно равны

$$\begin{aligned}\langle \sigma_x \rangle &= s_x = \langle +1 | \sigma_x | +1 \rangle = 0, \\ \langle \sigma_y \rangle &= s_y = \langle +1 | \sigma_y | +1 \rangle = 0, \\ \langle \sigma_z \rangle &= s_z = \langle +1 | \sigma_z | +1 \rangle = 1.\end{aligned}\quad (6.65)$$

Действительно, подставляя эти значения в (6.59), получим (6.64).

Если $|\psi\rangle$ — любое чистое состояние, то его всегда можно записать в виде разложения по состояниям $|+1\rangle$ и $|-1\rangle$:

$$|\psi\rangle = d_1 | +1 \rangle + d_2 | -1 \rangle, \quad (6.66)$$

(из условия нормировки $|d_1|^2 + |d_2|^2 = 1$) в представлении, в котором σ_z диагонально, т. е. в представлении (6.58); тогда для выражения (6.59) получаем

$$\rho = \begin{bmatrix} |d_1|^2 & d_1 d_2^* \\ d_1^* d_2 & |d_2|^2 \end{bmatrix}. \quad (6.67)$$

Легко показать, что $\text{Sp } \rho^2 = 1$, как и должно быть для любого чистого состояния.

Теперь рассмотрим поведение спина в магнитном поле $\mathbf{H}(t)$. Как мы уже знаем, в этом случае гамильтониан имеет вид

$$\mathbf{H} = \frac{\gamma \hbar}{2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}(t)). \quad (6.68)$$

Среднее значение магнитного момента $\mathbf{M}(t)$ равно

$$\mathbf{M} = \langle \boldsymbol{\mu} \rangle = \text{Sp } \rho(t) \boldsymbol{\mu} = -\frac{\gamma \hbar}{2} \text{Sp } \rho(t) \boldsymbol{\sigma}, \quad (6.69)$$

так как

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{\gamma \hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}. \quad (6.70)$$

В силу (6.68) уравнение движения для матрицы плотности $\rho(t)$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] = \frac{\gamma \hbar}{2} [(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}), \rho]. \quad (6.71)$$

В представлении Шредингера матрица плотности $\rho(t)$ определяется с помощью выражения (6.60) следующим образом:

$$\rho(t) = \frac{1}{2} [I + (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s}(t))]. \quad (6.72)$$

Отсюда получаем, что

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2} \left(\boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \right). \quad (6.73)$$

Таким образом, с помощью формул (6.72) и (6.73) уравнение (6.71) принимает вид

$$\frac{i\hbar}{2} \left(\boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \right) = \frac{\gamma\hbar}{4} [(\boldsymbol{\sigma} H), (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s})]. \quad (6.74)$$

Коммутатор в правой части этого уравнения можно записать в виде

$$\begin{aligned} [(\boldsymbol{\sigma} H), (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s})] &= (\boldsymbol{\sigma} H)(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s}) - (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s})(\boldsymbol{\sigma} H) = \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 H_i s_j (\sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i). \end{aligned} \quad (6.75)$$

Мы использовали тот факт, что величина \mathbf{s} является средним значением оператора $\boldsymbol{\sigma}$ и, следовательно, есть c -число. Магнитное поле также является c -числом, так как в нашей трактовке оно не квантовано.

Из формулы (6.75) очевидно, что в двойной сумме исчезают все члены, для которых $i = j$. Если же $i \neq j$, то мы можем записать выражение (6.75) с помощью (2.75) в другом виде:

$$[(\boldsymbol{\sigma} H), (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{s})] = 2i \sum_{[i, j, k]} H_i s_j \sigma_k = 2i ([H \mathbf{s}] \boldsymbol{\sigma}), \quad (6.76)$$

где i, j, k образуют четную перестановку чисел 1, 2, 3. С помощью формул (6.76) и (6.69) уравнение (6.74) можно записать следующим образом:

$$\left(\frac{\partial M}{\partial t} \boldsymbol{\sigma} \right) = -\gamma ([M H] \boldsymbol{\sigma}). \quad (6.77)$$

Это уравнение легко решить относительно $\partial M/\partial t$, если умножить обе его части справа на σ_i и вычислить след от обеих частей полученного выражения. Так как $\text{Sp } \sigma_i \sigma_j = 2\delta_{ij}$, то три компоненты намагниченности удовлетворяют следующему уравнению движения:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -\gamma [M H]. \quad (6.78)$$

Это классическое уравнение движения магнитного момента в магнитном поле, и оно представляет собой еще один пример применения теоремы Эренфеста. По форме это уравнение идентично гейзенберговским уравнениям движения для σ :

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\gamma [\sigma H]. \quad (6.79)$$

Если можно решить гейзенберговские уравнения движения, то можно решить классические уравнения, и наоборот.

6.8. Характеристическая функция

Характеристическая функция весьма полезна и удобна при описании статистических свойств ансамблей, находящихся как в чистом, так и в смешанном состоянии. Эта функция является производящей функцией для моментов высших порядков, которая обычно используется в классической статистике.

Мы рассмотрим оператор $\exp(i\xi A)$, где ξ — вещественный параметр и A — наблюдаемая величина. Среднее по ансамблю от $\exp(i\xi A)$ определяется с помощью формулы (6.10):

$$\langle e^{i\xi A} \rangle \equiv C_A(\xi) = \text{Sp } \rho(t) e^{i\xi A}, \quad (6.80)$$

где ρ и A взяты в шредингеровском представлении, а функция $C_A(\xi)$ называется квантовой характеристической функцией оператора A . Эта функция действительно является производящей функцией для моментов высших порядков, так как если по определению l -й момент от величины A равен

$$\langle A^l \rangle = \text{Sp } \rho(t) A^l, \quad (6.81)$$

то из формулы (6.80) сразу же следует, что

$$\langle A^l \rangle = \frac{\partial^l}{\partial (i\xi)^l} C_A(\xi) |_{\xi=0}. \quad (6.82)$$

Следовательно, если известна характеристическая функция для величины A , то все остальные моменты этой величины могут быть получены простым дифференцированием.

Характеристическую функцию можно представить в другой форме, из которой видно, как можно использовать эту функцию, чтобы получить статистические свойства ансамбля. Для этого запишем выражение (6.80) с помощью формулы (6.4) в виде

$$C_A(\xi) = \sum_{\psi} p_{\psi} \langle \psi(t) | e^{i\xi A} | \psi(t) \rangle \equiv \text{Sp } \rho(t) e^{i\xi A}. \quad (6.83)$$

Пусть оператор A имеет непрерывный спектр собственных значений от $-\infty$ до $+\infty$, а собственные векторы образуют полную ортонормированную систему. Тогда мы имеем

$$\begin{aligned} A |A'\rangle &= A' |A'\rangle, & \int_{-\infty}^{+\infty} |A'\rangle dA' \langle A'| &= I, & (6.84) \\ \langle A' | A'' \rangle &= \delta(A' - A''). \end{aligned}$$

Теперь с помощью этих соотношений можно записать выражение (6.83) следующим образом:

$$\begin{aligned} C_A(\xi) &= \sum_{\psi} p_{\psi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi(t) | A' \rangle dA' \langle A' | e^{i\xi A} | A'' \rangle dA'' \times \\ &\times \langle A'' | \psi(t) \rangle = \sum_{\psi} p_{\psi} \int_{-\infty}^{+\infty} |\langle \psi(t) | A' \rangle|^2 e^{i\xi A'} dA'. \end{aligned} \quad (6.85)$$

Мы видим, что в формулу (6.85) входит величина $|\langle \psi(t) | A' \rangle|^2 dA'$, которая представляет собой вероятность того, что измерение величины A для системы в состоянии $\langle \psi(t) |$ даст для A значение между A' и $A' + dA'$. Для

смешанного состояния усреднение по ансамблю дает

$$P(A') dA' = \sum_{\psi} p_{\psi} |\langle \psi | A' \rangle|^2 dA'. \quad (6.86)$$

Это выражение определяет функцию распределения вероятностей для переменной A' в данном ансамбле. Если мы используем определение (6.86) в формуле (6.85), то увидим, что характеристическая функция является не чем иным, как компонентой Фурье от функции распределения вероятностей состояний системы по данному ансамблю $P(A')$. Поэтому мы можем выполнить обратное преобразование и получить

$$P(A') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi A'} C_{A'}(\xi) d\xi. \quad (6.87)$$

Таким образом, характеристическая функция $C_{A'}(\xi)$ однозначно определяет функцию распределения вероятностей $P(A')$. Однако существуют некоторые особые случаи, для которых приведенное выше доказательство не является справедливым. Мы не будем их касаться.

Часто бывает более удобно вычислять характеристическую функцию в представлении Гейзенберга. В этом случае она имеет следующий вид:

$$C_A(\xi) = \text{Sp} [\rho_H(t_0) e^{i\xi A_H(t)}]. \quad (6.88)$$

Таким образом, для того чтобы изучить статистические свойства различных ансамблей, мы будем в дальнейшем вычислять характеристические функции этих ансамблей.

6.9. Распределение Пуассона

В этом разделе мы получим характеристические функции для импульса p и координаты q в момент времени t для ансамбля гармонических осцилляторов в том случае, когда в момент времени $t = 0$ этот ансамбль находится в чистом состоянии, соответствующем распределению Пуассона по состояниям фотонов с определенной энергией. В разделе 3.7 мы показали, что такое распределение Пуассона соответствует волновому пакету с минимальной

неопределенностью. В разделе 4.2 мы снова столкнулись с таким распределением. Там было показано, что для создания такого состояния поля излучения можно использовать классический генератор.

В последнем разделе этой главы мы кратко рассмотрим пример, в котором распределение Пуассона будет использовано также для описания смешанного состояния.

Как известно, гамильтониан гармонического осциллятора имеет вид

$$H = \hbar\omega a^+a.$$

В этом случае решение уравнения Шредингера можно записать в виде

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\omega t a^+a} |\psi(0)\rangle = \\ &= e^{-i\omega t a^+a} \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle \doteq \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-i\omega n t} |n\rangle. \end{aligned} \quad (6.89)$$

Если положить

$$c_n = \sqrt{\frac{\exp(-\bar{n}) \bar{n}^n}{n!}} e^{-in\varphi}, \quad (6.90)$$

где \bar{n} — постоянная, а φ — произвольная фаза, то начальное состояние одного осциллятора станет линейной комбинацией собственных состояний a^+a . В этом случае распределение вероятностей $|c_n|^2$ называется распределением Пуассона по начальным состояниям.

Нетрудно видеть, что при таком выборе начального состояния состояние $|\psi(t)\rangle$ системы в момент времени t можно представить с помощью соотношений (6.89) и (3.162) следующим образом:

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{\bar{n}}{2}\right) e^{w^* a^+} |0\rangle, \quad (6.91)$$

где

$$w^* = \sqrt{\bar{n}} e^{-i(\omega t + \varphi)} \quad (6.92)$$

и $|0\rangle$ — вакуумное состояние. Легко показать, что $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$.

С помощью полученных формул рассчитаем теперь характеристические функции для величин p и q . Обе эти

функции можно рассчитать, если ввести величину

$$A = \alpha a + \alpha^* a^+, \quad (6.93)$$

где согласно определению (2.20b) $A = p$, если положить

$$\alpha = \alpha_p = -i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}, \quad (6.94a)$$

и $A = q$, если выбрать

$$\alpha = \alpha_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}. \quad (6.94b)$$

Характеристическую функцию величины A для рассматриваемого ансамбля осцилляторов мы можем теперь получить, воспользовавшись определением (6.80):

$$C_A(\xi) = \text{Sp } \rho(t) e^{i\xi A}. \quad (6.95)$$

В том случае, когда осцилляторы находятся в чистом состоянии, заданном формулой (6.91), статистический оператор (6.4) сводится к следующему выражению:

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| = \exp(-\bar{n}) e^{w^* a^+} |0\rangle \langle 0| e^{wa}. \quad (6.96)$$

(Отметим, что $\text{Sp } \rho^2 = 1$, так что ρ описывает ансамбль, который находится в чистом состоянии.) Если мы подставим это выражение для $\rho(t)$ и выражение (6.93) для A в формулу (6.95), то получим

$$C_A(\xi) = \exp(-\bar{n}) \langle 0| e^{wa} e^{i\xi(\alpha a + \alpha^* a^+)} e^{w^* a^+} |0\rangle. \quad (6.97)$$

Теперь мы используем теорему 4 из гл. III (см. (3.20)) и запишем выражение (6.97) следующим образом:

$$\begin{aligned} C_A(\xi) &= e^{-\bar{n}} \langle 0| e^{wa} e^{i\xi\alpha a} e^{i\xi\alpha^* a^+} e^{w^* a^+} |0\rangle \exp\left(\frac{\xi^2 |\alpha|^2}{2}\right) \equiv \\ &\equiv \exp\left(-\bar{n} + \frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2\right) \langle 0| e^{(w+i\xi\alpha)a} e^{(w^*+i\xi\alpha^*)a^+} |0\rangle. \end{aligned} \quad (6.98)$$

Это выражение можно упростить с помощью теоремы 6 из гл. III (см. (3.38a)). Тогда мы получим

$$C_A(\xi) = \exp\left(-\bar{n} + \frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2\right) \langle 0| e^{(w^*+i\xi\alpha^*)(a^++w+i\xi\alpha)} |0\rangle,$$

так как $\exp(\lambda a) |0\rangle = |0\rangle$. После дальнейших упрощений получаем

$$C_A(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2|\alpha|^2\right) e^{i\xi(\alpha^*w + \alpha w^*)}, \quad (6.99)$$

так как из (6.92) $|w|^2 = \bar{n}$ и $\langle 0 | \exp(\lambda a^\dagger) | 0 \rangle = 1$. Это и есть характеристическая функция для ансамбля осцилляторов в чистом состоянии, который характеризуется распределением Пуассона по собственным состояниям фотонов $|n\rangle$. Из выражений (6.99) и (6.96) видно, что форма характеристической функции и форма матрицы плотности не меняются с течением времени.

Следует подчеркнуть, что распределение Пуассона по состояниям $|n\rangle$ соответствует гауссову распределению вероятностей по собственным состояниям импульса p и по собственным состояниям координаты q . Фактически мы уже показали это в разделе 3.7 (см. (3.149)). Интересно получить тот же результат с помощью фурье-преобразования характеристической функции (см. (6.87)). С помощью (6.99) имеем

$$P(A') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2|\alpha|^2 + i\xi(\langle A \rangle - A')\right] d\xi. \quad (6.100)$$

Согласно (6.99) два первых момента для A имеют вид

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{\partial C}{\partial (i\xi)} \Big|_{\xi=0} = \alpha w^* + \alpha^* w, \\ \langle A^2 \rangle &= \frac{\partial^2 C}{\partial (i\xi)^2} \Big|_{\xi=0} = \langle A \rangle^2 + |\alpha|^2. \end{aligned} \quad (6.101)$$

Это не что иное, как квантовые средние (по ансамблю) от A и A^2 . Нетрудно выполнить теперь интегрирование в (6.100) и получить

$$P(A') = \frac{\sqrt{2\pi}}{(\Delta A)} \exp\left[-\frac{(A' - \langle A \rangle)^2}{2(\Delta A)^2}\right], \quad (6.102)$$

где мы обозначили

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = |\alpha|^2. \quad (6.103)$$

Распределение (6.102) является гауссовым распределением вероятностей для переменной A' , которая равна p или q . В случае, когда $A' = q'$, это распределение может быть записано в более привычной форме:

$$P(q') = |\psi(q', t)|^2 = |\langle \psi(t) | q' \rangle|^2. \quad (6.104)$$

Отсюда следует, что распределение Пуассона по собственным состояниям оператора $a+a$, соответствующее волновому пакету с минимальной неопределенностью, является одновременно с этим гауссовым распределением по собственным состояниям величин p и q . Это согласуется с результатами раздела 3.7.

В разделе 4.2 было показано, что генератор когерентного сигнала, связанный с некоторой модой резонатора, будет генерировать распределение Пуассона по собственным состояниям фотонов в том случае, когда резонатор первоначально находится в вакуумном состоянии. Поэтому сигнал в полости можно представить с помощью рассмотренного нами распределения Пуассона.

Как известно, если информация о состоянии квантовой системы в момент времени $t = 0$ не является полной, то в этом случае ансамбль находится в смешанном состоянии. Определенный интерес представляет тот случай, когда состояние системы описывается распределением Пуассона, но со случайной фазой. Это означает, что любые значения фазы в выражении (6.96) равновероятны.

Рассмотрим теперь состояние одного элемента из этого ансамбля. Его можно представить в виде

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{\bar{n}}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(V\bar{n} e^{-i\omega t})^n}{V n!} |n\rangle e^{-i\varphi_n}. \quad (6.105)$$

Статистический оператор (6.4) для такого ансамбля со случайной фазой имеет вид

$$\rho(t) = \exp(-\bar{n}) \sum_{n,m=0}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_m}{2\pi} \frac{e^{i(\varphi_m - \varphi_n)}}{V n! m!} \times \\ \times (V\bar{n} e^{-i\omega t})^n |n\rangle \langle m| (V\bar{n} e^{i\omega t})^m. \quad (6.106)$$

Интегралы по φ_n и φ_m обращаются в нуль для всех значений $\varphi_n \neq \varphi_m$. Это значит, что оператор ρ диагонален в

рассматриваемом представлении, и согласно (6.106) он приобретает вид

$$\rho(t) = \exp(-\bar{n}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} |n\rangle \langle n|. \quad (6.107)$$

Диагональные элементы оператора ρ в этом представлении имеют вид

$$\langle n | \rho | n \rangle \equiv p_n = \frac{\exp(-\bar{n}) \bar{n}^n}{n!} \quad (6.108)$$

и представляют собой вероятности, которые распределены по Пуассону. Хотя $\text{Sp } \rho = \sum_0^{\infty} p_n = 1$, но мы видим, что

$\text{Sp } \rho^2 = \sum_0^{\infty} p_n^2 \neq 1$. Это означает, как известно, что ансамбль находится в смешанном состоянии. Между прочим, так как величина

$$\begin{aligned} \langle a^+ a \rangle &= \text{Sp } \rho a^+ a = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\bar{n}) \langle n | a^+ a | n \rangle \frac{\bar{n}^n}{n!} = \\ &= \exp(-\bar{n}) \sum_0^{\infty} n \frac{\bar{n}^n}{n!} = \bar{n} \end{aligned} \quad (6.109)$$

является постоянной, то оператор ρ в (6.107) не зависит от времени.

В качестве упражнения мы предлагаем читателю доказать, что характеристическая функция величины A вида (6.93) для ансамбля гармонических осцилляторов, который описывается статистическим оператором (6.107), имеет вид

$$C_A(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2\right) J_0(2\xi |\alpha| \sqrt{\bar{n}}), \quad (6.110)$$

где J_0 — функция Бесселя нулевого порядка [40]. В выражении (6.107) отсутствуют недиагональные элементы, в то время как в (6.96) они есть, и это привело к существенному изменению характеристической функции. Диагональные же элементы одинаковы в обоих случаях.

Таким образом, мы видим, что выражение (6.96) имеет определенный физический смысл, а именно, оно описывает сигнал с определенной фазой. Бэннет [40] показал, что характеристическая функция вида (6.110) соответствует синусоидальной волне, которая сопровождается гауссовым шумом. В разделе 6.11 мы получим статистический оператор, который описывает сигнал в присутствии гауссова шума.

6.10. Экспоненциальное распределение

Другое распределение, которое часто появляется в теории шумов,— это экспоненциальное распределение по состояниям фотонов $|n\rangle$. Его можно использовать для описания ансамбля гармонических осцилляторов, который находится в тепловом равновесии с тепловым резервуаром при температуре T . С помощью выражений (6.49) и (6.50) в том случае, когда $H = \hbar\omega a^\dagger a$ и $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$, можно получить, что

$$\rho = (1 - e^{-\lambda}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda n} |n\rangle \langle n|, \quad (6.111)$$

где $\lambda = \beta \hbar \omega \equiv \hbar \omega / kT$. Нетрудно видеть, что $\text{Sp } \rho^2 \neq 1$; таким образом, рассматриваемый нами ансамбль находится в смешанном состоянии. Естественно, что это распределение называется экспоненциальным.

Вычислим теперь характеристическую функцию для величины $A = aa^\dagger + a^\dagger a$ в том случае, когда ансамбль описывается формулой (6.111). В этом случае имеем

$$\begin{aligned} C_A(\xi) &= \text{Sp} [\rho(t) e^{i\xi(aa^\dagger + a^\dagger a)}] = \\ &= (1 - e^{-\lambda}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda n} \langle n | e^{i\xi(aa^\dagger + a^\dagger a)} | n \rangle = \\ &= (1 - e^{-\lambda}) e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \alpha \alpha'} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda n} \langle n | e^{i\xi \alpha' a^\dagger} e^{i\xi \alpha a} | n \rangle, \quad (6.112) \end{aligned}$$

где мы использовали теорему 4 (см. (3.20)) из гл. III. Чтобы рассчитать матричные элементы в (6.112), запишем состояние $|n\rangle$ в виде $|n\rangle = (a^{\dagger n} / \sqrt{n!}) |0\rangle$. Используем

теперь теорему 6 гл. III (см. (3.38a)) и равенство
 $\exp(\lambda a) |0\rangle = |0\rangle$.

Тогда $C_A(\xi)$ преобразуется к следующему виду:

$$C_A(\xi) = (1 - e^{-\lambda}) e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \alpha \alpha'} \times \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-\lambda n}}{n!} \langle 0 | (a + i\xi\alpha')^n (a^\dagger + i\xi\alpha)^n | 0 \rangle.$$

Так как

$$(a^\dagger + i\xi\alpha)^n |0\rangle = \sum_{m=0}^n \frac{n! (i\xi\alpha)^{n-m}}{(n-m)! \sqrt{m!}} |m\rangle, \\ \langle 0 | (a + i\xi\alpha')^n = \sum_{l=0}^n \frac{n! (i\xi\alpha')^{n-l}}{(n-l)! \sqrt{l!}} \langle l |,$$

где мы снова заменили $(a^{+m} / \sqrt{m!}) |0\rangle = |m\rangle$, то выражение для $C_A(\xi)$ приобретает вид

$$C_A(\xi) = (1 - e^{-\lambda}) e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \alpha \alpha'} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{e^{-\lambda n} n! (-\xi^2 \alpha \alpha')^{n-m}}{(n-m)!^2 m!}. \quad (6.113)$$

Здесь было использовано соотношение ортогональности $\langle l | m \rangle = \delta_{lm}$.

Вычислим сумму в формуле (6.113). Для этого заменим индексы суммирования

$$n - m = l, \quad n = r.$$

Тогда выражение (6.113) приобретет вид

$$C_A(\xi) = (1 - e^{-\lambda}) e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \alpha \alpha'} \sum_{r=0}^{\infty} e^{-\lambda r} \sum_{l=0}^r \frac{r! (-\xi^2 \alpha \alpha')^l}{(r-l)! l!^2}. \quad (6.114)$$

Так как

$$\sum_{l=0}^r \frac{r! (-x)^l}{(r-l)! l!^2} = L_r(x), \quad (6.115)$$

где $L_r(x)$ — полином Лагерра, а

$$\sum_{r=0}^{\infty} z^r L_r(x) = \frac{e^{xz/(z-1)}}{1-z}, \quad (6.116)$$

то суммы в (6.114) приводятся к следующему виду:

$$C_A(\xi) = \exp \left[-\frac{1}{2} \xi^2 \alpha \alpha' \left(1 - \frac{2}{1-e^\lambda} \right) \right] \equiv e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \mu}, \quad (6.117)$$

где

$$\mu = \alpha \alpha' \left(1 - \frac{2}{1-e^\lambda} \right) = \alpha \alpha' \operatorname{cth} \frac{\lambda}{2}. \quad (6.118)$$

С помощью характеристической функции (6.117) доказывается теорема, предложенная Блохом. При определенном выборе α и α' можно записать $A = \alpha a + \alpha' a^\dagger$ в виде линейной комбинации величин p и q . Теорема Блоха утверждает, что закон распределения вероятностей любой линейной комбинации величин p и q имеет вид распределения Гаусса. Таким образом, если в соответствии с (6.94) $\alpha' = \alpha^* = \alpha_p$ или α_q , то выражение (6.117) сводится к следующим:

$$C_p(\xi) = e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \mu_p}, \quad C_q(\xi) = e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \mu_q}, \quad (6.119)$$

где

$$\mu_p = \frac{\hbar \omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2kT}, \quad \mu_q = \frac{\hbar}{2\omega} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2kT}, \quad (6.120)$$

так как для осцилляторов, которые находятся в тепловом равновесии с резервуаром тепла, $\lambda = \hbar \omega / kT$. С помощью этих характеристических функций можно получить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \langle q \rangle &= 0, & \langle p \rangle &= 0, \\ \langle q^2 \rangle &= \mu_q, & \langle p^2 \rangle &= \mu_p. \end{aligned} \quad (6.121)$$

В результате среднее значение энергии E равно

$$E = \frac{1}{2} (\langle p^2 \rangle + \omega^2 \langle q^2 \rangle) = \frac{\hbar \omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega}{2kT}. \quad (6.122)$$

Если величина \bar{n} равна среднему значению оператора

$a^\dagger a$, то среднее число квантов осциллятора для такого ансамбля определяется из соотношения

$$\hbar\omega \left(\bar{n} + \frac{1}{2} \right) = E = \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT},$$

или

$$\bar{n} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (6.123)$$

Это есть не что иное, как известная формула Планка, которая согласуется с (6.45). Поэтому ансамбль с экспоненциальным распределением вида (6.111) описывает гауссов шум. Мы оставляем читателю в качестве упражнения расчет энтропии этого ансамбля.

Если мы теперь вычислим фурье-образы выражений (6.119), то согласно соотношению (6.87) получим функции распределения вероятностей в q - и p -представлениях. Они имеют вид

$$|\psi(q')|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi q'} e^{-\frac{1}{2} \xi^2 \mu_q} d\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu_q}} e^{-q'^2/2\mu_q}, \quad (6.124a)$$

$$|\varphi(p')|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu_p}} e^{-p'^2/2\mu_p}. \quad (6.124b)$$

Эти квадраты модулей волновых функций в q - и p -представлениях являются гауссовыми распределениями с центрами при $p'=q'=0$ и со среднеквадратичными отклонениями от центра, равными соответственно μ_q и μ_p .

6.11. Сигнал плюс шум

В разделе 6.6 мы показали, что энтропия системы является мерой недостатка информации об элементах ансамбля. Если мы максимизируем энтропию при дополнительных условиях, соответствующих нашим знаниям о системе, то тогда мы получим статистический оператор, описывающий систему в рамках используемых ограничений и дополнительных условий.

Рассмотрим энтропию, которая определяется соотношением

$$S = -k \operatorname{Sp} \rho \ln \rho, \quad (6.125)$$

при дополнительных условиях [40]

$$\text{Sp } \rho = 1, \quad (6.126a)$$

$$\langle H \rangle = \text{Sp } \rho H, \quad (6.126b)$$

$$\langle p \rangle = \text{Sp } \rho p, \quad (6.126c)$$

$$\langle q \rangle = \text{Sp } \rho q. \quad (6.126d)$$

В этом случае для ансамбля известны среднее значение энергии и средние значения импульса $\langle p \rangle$ и координаты $\langle q \rangle$. Если мы, используя метод неопределенных множителей Лагранжа, максимизируем энтропию S при дополнительных условиях (6.126), то получим, что

$$\text{Sp}(1 + \ln \rho + \beta H + \lambda_1 + \lambda_2 p + \lambda_3 q) \delta \rho = 0,$$

где β и $\lambda_{1,2,3}$ определяются из условий (6.126). Так как величина $\delta \rho$ является произвольной вариацией, то записанное выше уравнение удовлетворяется в том случае, когда выражение в круглых скобках обращается в нуль. Это дает для ρ

$$\rho = e^{-(1+\lambda_1)} e^{-\beta H - \lambda_2 p - \lambda_3 q}.$$

Постоянная нормировки $\exp[-(1 + \lambda_1)]$ определяется из уравнения (6.126a), так что

$$\rho = \frac{e^{-\beta H - \lambda_2 p - \lambda_3 q}}{\text{Sp}(e^{-\beta H - \lambda_2 p - \lambda_3 q})}. \quad (6.127)$$

Отметим, что каждый раз, когда приобретается новая информация о системе, заново вычисляется статистический оператор.

Прямой расчет постоянных β , λ_2 и λ_3 с помощью (6.126b), (6.126c) и (6.126d) затруднен, и поэтому мы используем некоторый косвенный метод. Так как величины p и q являются линейными комбинациями операторов a и a^\dagger и так как $H = \hbar \omega a^\dagger a$, то мы можем переписать выражение (6.127) следующим образом:

$$\rho = (1 - e^{-\lambda}) e^{-\lambda(a - w)(a^\dagger - w^*)}. \quad (6.128)$$

Здесь мы положим $\lambda = \hbar \omega \beta$, $\lambda w = -\sqrt{\hbar/2\omega}(\lambda_3 - i\omega\lambda_2)$ и $\lambda w^* = -\sqrt{\hbar/2\omega}(\lambda_3 + i\omega\lambda_2)$, где λ_2 и λ_3 предполагаются

действительными числами; λ , w и w^* — неопределенные параметры. Как мы увидим в дальнейшем, член $(1 - e^{-\lambda}) \exp(-\lambda|w|^2)$ необходим для того, чтобы выполнялось условие $\text{Sp} \rho = 1$.

Прежде чем переходить к вычислению параметров λ и w через среднюю энергию и средние значения электрического и магнитного полей, введем два новых оператора:

$$c^+ = a^+ - w, \quad c = a - w^*, \quad (6.129)$$

где w и w^* есть c -числа. Нетрудно видеть, что операторы c , c^+ удовлетворяют тем же соотношениям коммутации, что и операторы a и a^+ . В силу этого мы можем ввести совокупность новых базисных векторов $\{|n\rangle_c\}$ с помощью следующих соотношений:

$$\begin{aligned} c^+c|n\rangle_c &= n|n\rangle_c, \\ c|n\rangle_c &= \sqrt{n}|n-1\rangle_c, \\ c^+|n\rangle_c &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle_c. \end{aligned} \quad (6.130)$$

Характеристическая функция для оператора

$$A = \alpha a + \alpha^* a^+ = \alpha c + \alpha^* c^+ + \alpha w^* + \alpha^* w \quad (6.131)$$

имеет вид

$$\begin{aligned} C_A(\xi) &= \text{Sp} \rho e^{i\xi A} = \\ &= e^{i\xi(\alpha w^* + \alpha^* w)} (1 - e^{-\lambda}) \text{Sp} [e^{-\lambda c^+ c} e^{i\xi(\alpha c + \alpha^* c^+)}], \end{aligned}$$

где мы выразили оператор ρ из (6.128) через c и c^+ . Теперь мы можем рассчитать след в представлении, в котором оператор c^+c диагонален. В результате мы получим, что

$$\begin{aligned} C_A(\xi) &= e^{i\xi(\alpha w^* + \alpha^* w)} \exp\left(-\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2\right) \times \\ &\times (1 - e^{-\lambda}) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\lambda n} {}_c\langle n | e^{i\xi \alpha^* c^+} e^{i\xi \alpha c} | n \rangle_c = e^{i\xi(\alpha w^* + \alpha^* w) - \frac{1}{2} \xi^2 \mu}, \end{aligned} \quad (6.132)$$

где

$$\mu = |\alpha|^2 \text{cth} \frac{\lambda}{2}. \quad (6.133)$$

Здесь мы использовали результаты (6.112) и (6.117), так как собственные состояния оператора c^+c ведут себя так же, как и собственные состояния оператора a^+a .

С помощью характеристической функции (6.132) легко получить средние значения электрического и магнитного полей:

$$\langle p \rangle = i \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} (w - w^*), \quad \langle q \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} (w + w^*). \quad (6.134)$$

Из этих соотношений множители Лагранжа w и w^* можно выразить теперь через измеримые значения $\langle p \rangle$ и $\langle q \rangle$ электрического и магнитного полей соответственно.

Вторые моменты этих полей равны

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \langle p \rangle^2 + \mu_p \equiv \langle p \rangle^2 + \frac{\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\lambda}{2}, \\ \langle q^2 \rangle &= \langle q \rangle^2 + \mu_q \equiv \langle q \rangle^2 + \frac{\hbar}{2\omega} \operatorname{cth} \frac{\lambda}{2}. \end{aligned} \quad (6.135)$$

Мы определим λ из средней энергии поля, отсчитанной относительно энергии нулевых колебаний поля, а именно:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{2} (\langle p^2 \rangle + \omega^2 \langle q^2 \rangle) - \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{1}{2} (\langle p \rangle^2 + \omega^2 \langle q \rangle^2) + \\ &+ \frac{\hbar\omega}{2} (\operatorname{cth} \frac{\lambda}{2} - 1) = \hbar\omega\bar{n} + \frac{\hbar\omega}{2} (\operatorname{cth} \frac{\lambda}{2} - 1), \end{aligned} \quad (6.136)$$

где $\bar{n} = |w|^2$ — среднее число квантов сигнала. Первый член представляет собой среднюю энергию сигнала, а второй — среднюю энергию шумов. Решив уравнение (6.136) относительно λ , получим

$$\frac{\hbar\omega}{e^\lambda - 1} = \langle E \rangle - \hbar\omega\bar{n}.$$

Если мы положим $\lambda = \hbar\omega\beta'$ и перейдем к пределу при $\hbar \rightarrow 0$, то тогда $\langle E \rangle \rightarrow kT$, где T — равновесная температура. В то же время величина $\hbar\omega\bar{n}$ стремится к своему классическому значению, так что выписанное выше равенство превращается в следующее:

$$\frac{1}{\beta'} = kT - \hbar\omega\bar{n}.$$

Мы можем теперь определить эффективную температуру T' с помощью соотношения

$$\beta' = \frac{1}{kT'} = \frac{1}{kT - \hbar\omega\bar{n}}.$$

Отсюда следует, что $\lambda = \hbar\omega/kT'$ и благодаря присутствию сигнала эффективная температура становится меньше, чем действительная температура T теплового резервуара. Следовательно, статистический оператор (6.128) описывает сигнал в присутствии гауссова шума.

6.12. Энтропия сигналов и шумов

Как мы показали ранее, для ансамбля, который описывается статистическим оператором (6.96):

$$\rho = \exp(-\bar{n}) e^{w^*a^\dagger} |0\rangle\langle 0| e^{wa}, \quad (6.137)$$

выполняется условие $\text{Sp } \rho^2 = 1$ ($|w|^2 = \bar{n}$), так что система находится в чистом состоянии. В данном случае о системе известна вся информация, которая допускается квантовой механикой. Поэтому энтропия такой системы должна быть равна нулю. Проверим этот общий вывод на примере вычисления энтропии для одного специального случая.

Предварительно заметим, что оператор $|0\rangle\langle 0|$ можно записать следующим образом *):

$$|0\rangle\langle 0| = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} e^{-\varepsilon a^\dagger + a} = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} N \{ \exp(e^{-\varepsilon} - 1) \bar{a}^\dagger + \bar{a} \}, \quad (6.138)$$

где N — оператор нормального упорядочения, который был введен в гл. III. Для того чтобы показать это, рассмотрим матричные элементы операторов в левой и правой частях равенства (6.138). Матричный элемент оператора $|0\rangle\langle 0|$ равен $\delta_{n0}\delta_{m0}$, в то время как в правой части получаем

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \langle n | e^{-\varepsilon a^\dagger + a} | m \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} e^{-\varepsilon m} \delta_{nm}$$

и видим, что

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} e^{-\varepsilon m} = \begin{cases} 0, & m \neq 0, \\ 1, & m = 0. \end{cases}$$

Поэтому правая часть равна $\delta_{nm}\delta_{m0} = \delta_{n0}\delta_{m0}$, и утверждение доказано.

*) Эта форма записи проекционного оператора была рекомендована автору Геффнером.

Вторая форма выражения (6.138) уже рассматривалась нами ранее в гл. III.

С помощью выражения (6.138) мы можем представить теперь оператор плотности (6.137) в виде

$$\begin{aligned} \rho &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \exp(-\bar{n}) e^{w^* a^+} N \{ \exp(e^{-\varepsilon} - 1) \bar{a}^+ \bar{a} \} e^{w a} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \exp\left(\frac{\bar{n}}{e^\varepsilon - 1}\right) N \times \\ &\times \left\{ \exp\left[(e^{-\varepsilon} - 1) \left(\bar{a}^+ + \frac{w}{e^{-\varepsilon} - 1} \right) \left(\bar{a} + \frac{w^*}{e^{-\varepsilon} - 1} \right) \right] \right\}. \quad (6.139) \end{aligned}$$

Последняя форма ρ следует из того, что предыдущее выражение для ρ уже приведено к нормальной форме. А тогда под знаком оператора N можно образовать полный квадрат.

Если мы сравним статистический оператор (6.139) для ансамбля в чистом пуассоновском состоянии со статистическим оператором (6.128), который описывает ансамбль в смешанном состоянии, то мы увидим, что они имеют одинаковую форму, если заменить величину λ в (6.128) на $1 - e^{-\varepsilon}$, а величину w в (6.128) на $w/(1 - e^{-\varepsilon})$. Тогда (6.128) и (6.139) будут отличаться лишь оператором нормального упорядочения.

Отсюда видно, каким образом можно найти представление, в котором матрица плотности ρ в (6.139) диагональна. Для этого положим

$$c = a - \frac{w^*}{1 - e^{-\varepsilon}}, \quad c^+ = a^+ - \frac{w}{1 - e^{-\varepsilon}}. \quad (6.140)$$

Тогда выражение (6.139) приобретает вид

$$\begin{aligned} \rho &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \exp\left(\frac{\bar{n}}{e^\varepsilon - 1}\right) N \{ \exp[-(1 - e^{-\varepsilon}) c^+ c] \} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \exp\left(\frac{\bar{n}}{e^\varepsilon - 1}\right) e^{-\varepsilon c^+ c}. \quad (6.141) \end{aligned}$$

Здесь мы уже перешли к выражению, не приведенному к нормальной форме. В силу того, что

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} \exp\left(\frac{\bar{n}}{e^\varepsilon - 1}\right) = 1,$$

мы можем записать ρ в виде

$$\rho = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} e^{-\varepsilon c^\dagger c}. \quad (6.142)$$

Теперь очень легко рассчитать энтропию в представлении, в котором оператор $c^\dagger c$ диагонален. Если $c^\dagger c |n\rangle_c = n |n\rangle_c$, то

$$\begin{aligned} S &= -k \operatorname{Sp} \rho \ln \rho = -\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} k \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | e^{-\varepsilon c^\dagger c} \ln e^{-\varepsilon c^\dagger c} | n \rangle_c = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +\infty} k\varepsilon \sum_{n=0}^{\infty} n (e^{-\varepsilon})^n = \lim_{\varepsilon \rightarrow \infty} k\varepsilon \frac{e^{-\varepsilon}}{(1 - e^{-\varepsilon})^2} \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Таким образом, путем прямых вычислений мы показали, что энтропия рассматриваемой системы, находящейся в чистом состоянии, равна нулю.

Сравнивая выражения (6.138) и (6.142), можно отметить, что для чистого пуассоновского состояния матрицу плотности ρ можно записать также следующим образом:

$$\rho = |0\rangle_c \langle 0| = \exp(-\bar{n}) e^{w^* a^\dagger} |0\rangle_a \langle 0| e^{wa}, \quad (6.143)$$

где $|0\rangle_c$ — вакуумное состояние для операторов c и c^\dagger . Независимо от проведенного выше анализа можно показать, что

$$|0\rangle_c = \exp\left(-\frac{\bar{n}}{2}\right) e^{w^* a^\dagger} |0\rangle_a \quad (6.144)$$

(см. задачу 6.9).

Энтропию для состояния (6.128), в котором одновременно с сигналом имеется некоторый шум, можно очень просто рассчитать в использованном нами c -представлении. В этом случае мы получим

$$\begin{aligned} S &= \frac{k\lambda}{e^\lambda - 1} - k \ln(1 - e^{-\lambda}) = \\ &= \frac{\hbar\omega}{T' [\exp(\hbar\omega/kT') - 1]} - k \ln\left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT'}\right)\right], \quad (6.145) \end{aligned}$$

где, как и в предыдущем разделе, мы положили $\lambda = \hbar\omega/kT'$ и $kT' = \langle E \rangle - \hbar\omega\bar{n}$.

Легко также показать, что энтропия состояния, которое представляет собой только экспоненциальный шум вида (6.111), равна

$$S = \frac{\hbar\omega}{T [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]} - k \ln \left[1 - \exp \left(-\frac{\hbar\omega}{kT} \right) \right].$$

Если мы предположим, что средняя энергия для ансамблей, которые описываются статистическими операторами (6.128) и (6.111), одинакова, то $T' = T - (\hbar\omega\bar{n}/k) < T$, так что информация о сигнале $\langle p \rangle$ и $\langle q \rangle$ в (6.128) уменьшила энтропию.

ЗАДАЧИ

6.1. В представлении взаимодействия найти выражение для статистического оператора в том случае, когда гамильтониан имеет вид $H = H_0 + H'$. Предположить, что H не зависит от времени.

6.2. Доказать, что $\text{Sp} |u\rangle \langle v| = \langle v | u \rangle$, если $|u\rangle$ и $|v\rangle$ — два любых кет-вектора.

6.3. Выразить статистический оператор (6.4) через полную ортогональную систему векторов состояний $\{|k\rangle\}$, где

$$\sum_k |k\rangle \langle k| = I.$$

6.4. Вывести характеристическую функцию (6.110). При этом кроме выражения (6.115) необходимо использовать также следующую формулу:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} L_n(x) = e^z J_0(2\sqrt{xz}),$$

где J_0 — функция Бесселя нулевого порядка. С помощью этой характеристической функции показать, что $\langle A \rangle = 0$ и $\langle A^2 \rangle = |\alpha|^2 (2\bar{n} + 1)$.

6.5. Для ансамблей, которые описываются статистическими операторами (6.96), (6.107), (6.111) и (6.128), вычислить величину $\langle \exp(\zeta a^\dagger + a) \rangle$, где ζ — параметр. Здесь роль величины A играет выражение $\zeta a^\dagger + a$.

6.6. Рассмотреть два связанных осциллятора с частотами ω_1 и ω_2 , которые описываются гамильтонианом

$$H = \hbar\omega_1 a^\dagger a + \hbar\omega_2 b^\dagger b + \hbar k (ab^\dagger + a^\dagger b),$$

причем каждый из операторов a коммутирует с каждым из операторов b , но $[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$. Здесь k — малая константа связи. Рассчитать статистический оператор в нормальной форме в момент времени t , если при $t = 0$ он задан следующим образом:

$$\rho(0) = (1 - e^{-\lambda_1}) (1 - e^{-\lambda_2}) e^{-\lambda_1(a^\dagger - w)(a - w^\dagger)} e^{-\lambda_2 b^\dagger b}.$$

У к а з а н и е: предположить, что оператор $\rho(t)$ задан в нормальной форме, и, используя результаты гл. III, привести правую часть уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \rho^{(n)}}{\partial t} = [H\rho^{(n)} - \rho^{(n)}H]$$

к нормальной форме.

6.7. Доказать, что необходимым и достаточным условием того, что эрмитов положительно определенный оператор ρ , след которого равен единице, описывает ансамбль в чистом состоянии, является условие $\text{Sp } \rho^2 = 1$.

6.8. Найти статистический оператор для ансамбля частиц со спином $1/2$, максимизируя энтропию при следующих дополнительных условиях: $\text{Sp } \rho = 1$ и $\langle \delta \rangle = \mathbf{s} = \text{Sp } \rho \delta$. Выразить множители Лагранжа через \mathbf{s} и показать, что результат согласуется с выражением (6.60). В ходе доказательства показать, что

$$\exp\left(-\sum_{i=1}^3 \lambda_i \sigma_i\right) = \text{ch} \sqrt{\sum_{i=1}^3 \lambda_i^2} - \frac{\text{sh} \sqrt{\sum_{i=1}^3 \lambda_i^2}}{\sqrt{\sum_{j=1}^3 \lambda_j^2}} \sum_{k=1}^3 \lambda_k \sigma_k,$$

где λ_i — множители Лагранжа.

6.9. Показать, что для операторов c и c^+ и векторов состояний $|n\rangle_c$, которые определены формулами (6.129) и (6.130), имеют место следующие соотношения:

$$\begin{aligned} |{}_a\langle 0 | 0 \rangle_c|^2 &= \exp(-1/2 |w|^2), \\ {}_a\langle n | 0 \rangle_c &= (w^{*n} / \sqrt{n!}) |{}_a\langle 0 | 0 \rangle_c|^2, \\ |0\rangle_c &= |{}_a\langle 0 | 0 \rangle_c|^2 \exp(w^* a^+) |0\rangle_a. \end{aligned}$$

Вектор состояния с индексом a является собственным вектором оператора a^+a , а индексом c отмечаются собственные векторы оператора c^+c .

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА АТТЕНЮАТОРОВ И ЛИНЕЙНЫХ УСИЛИТЕЛЕЙ

7.1. Введение

Атом с двумя энергетическими уровнями может переходить на более низкий энергетический уровень с одновременным испусканием фотона как за счет стимулированного (индуцированного), так и за счет спонтанного излучения. Он может также поглотить фотон из поля падающего излучения и перейти на верхний энергетический уровень. В гл. V мы видели, что вероятность индуцированного излучения совпадает с вероятностью поглощения. Тогда, если на некоторое время пренебречь спонтанным излучением и предположить, что большинство атомов в поле излучения находится в нижнем энергетическом состоянии, то из падающего на атомную систему излучения будет поглощено больше фотонов, чем испущено возбужденными атомами. В этом случае мы имеем дело с процессом поглощения излучения, проходящего через систему атомов. Этот процесс является обычным процессом поглощения в случае, когда атомы находятся в тепловом равновесии при температуре T , так как в этом случае распределение атомов по возможным состояниям описывается распределением Больцмана. При этом на нижних уровнях находится большее количество атомов, чем на верхнем энергетическом уровне. С другой стороны, если сделать так, что на верхнем энергетическом уровне находится большее количество атомов, чем на нижнем, то излучаться будет большее число квантов, чем поглощаться. В этом случае будет происходить усиление падающего излучения. Такова простейшая теория работы лазера [42].

Состояние вещества, когда большая часть атомов находится в верхнем возбужденном состоянии, получило название инверсной населенности. Процесс создания такого состояния получил название «накачки».

Усиление излучения в системе обусловливается индуцированными переходами атомов в нижнее энергетическое состояние. Это индуцированное излучение когерентно с падающим излучением. Одновременно, как мы уже знаем, происходит спонтанная эмиссия излучения возбужденными атомами. Это излучение носит случайный характер по отношению к входному сигналу и дает дополнительный вклад в величину шума усиливаемого сигнала. Так как спонтанное излучение имеет квантовую природу, то оно называется обычно квантовым шумом. В данной главе наибольший интерес для нас представляют те эффекты спонтанного излучения, которые ограничивают предельную чувствительность мазера [43—65]. Мы не будем здесь рассматривать влияние накачки, ибо спонтанное излучение не зависит от того, как атомы переходят в возбужденное состояние.

Спонтанное излучение тесно связано с шириной линии излучения. При изучении естественной ширины было показано, что возбужденный атом, связанный с полем излучения, самопроизвольно распадается за конечное время, называемое временем жизни. Это явление самопроизвольного распада называется спонтанным излучением, и именно оно ответственно за естественную ширину линии излучения атома. Процесс распада можно представить себе как такой процесс, при котором одна квантовая система (атом) связывается с большим числом гармонических осцилляторов (осцилляторами поля). При этом в процессе распада энергия атома переходит к этим осцилляторам, так что система осцилляторов по отношению к атому играет роль некоторого поглотителя энергии.

Нас будет интересовать эмпирическая модель мазера, которая описывает и спонтанное излучение. Такая модель позволит нам количественно изучить влияние спонтанного излучения на процесс усиления. Процесс усиления, как мы знаем, включает в себя и некоторый механизм потерь. Поэтому данная глава и начинается с описания определенной феноменологической модели механизма потерь. Механизм потерь мы свяжем с релаксацией состояний

одиноким атомом в поле излучения, т. е. с процессом, изученным в гл. V. В разделах 7.2—7.4 мы будем детально обсуждать эту модель, а также некоторые ее статистические свойства. Далее, в разделах 7.5—7.7, мы обсудим простую модель лазера и выведем для нее характеристическую функцию. В разделе 7.8 мы определим ширину полосы лазера для того, чтобы с ее помощью обсудить характеристики стационарного состояния лазера резонаторного типа. В последних разделах главы мы рассмотрим квантовую теорию параметрического усилителя и преобразователя частоты [11].

Задачи, которые мы рассмотрим в настоящей главе, имеют отношение не только к теории лазеров. В других случаях с их помощью можно изучать теорию броуновского движения, процессы релаксации спинов в решетке, флуктуации давления в газах, лэмбовский сдвиг и многое другое.

§7.2. Модель механизма потерь. Фононы

Рассматриваемая нами ниже модель механизма потерь основана на модели, используемой в теории естественной ширины линии излучения атомов. Последняя была также использована в расчетах Синитски [51].

Гамильтониан одной моды поля излучения в резонаторе имеет вид $H = \hbar\omega a^\dagger a$. Решение уравнения движения для оператора $a(t)$ в представлении Гейзенберга имеет в этом случае вид $a(t) = a e^{-i\omega t}$. Попытаемся теперь по аналогии с сопротивлением в обычных электрических цепях феноменологически ввести в уравнения движения для операторов член, связанный с потерями в резонаторе. Тогда затухающие решения для соответствующих уравнений движения можно записать в форме

$$a(t) = a e^{-i\omega t - (\gamma/2)t}, \quad a^\dagger(t) = a^\dagger e^{i\omega t - (\gamma/2)t}.$$

Эти решения могут быть получены просто путем замены частоты ω в решениях без потерь на величину $\omega + i(\gamma/2)$. Если мы теперь при наличии потерь вычислим коммутатор операторов a и a^\dagger , то получим

$$[a(t), a^\dagger(t)] = e^{-\gamma t},$$

так как коммутатор операторов a и a^+ равен $[a, a^+] = 1$. Мы видим, что для моментов времени t , для которых $\gamma t \ll 1$, коммутатор операторов $a(t)$ и $a^+(t)$ равен единице, и мы по-прежнему можем считать их коммутирующими операторами, как это и должно быть в квантовой теории. Однако для моментов времени t , для которых $\gamma t \gg 1$, этот коммутатор стремится к нулю, а это в свою очередь приводит к нарушению принципа неопределенности. Формально это связано с тем, что обычный член, характеризующий затухание, недостаточен для феноменологического описания механизма потерь в уравнениях Гейзенберга для операторов, которые совпадают по внешнему виду с классическими уравнениями движения. Трудность состоит в том, что модель с обычным затухающим членом учитывает потери в резонаторе с квантованным полем, но не учитывает влияния источника потерь на поле в резонаторе.

Когда время жизни атома в возбужденном состоянии достаточно велико, процессы испускания и поглощения излучения можно учитывать с помощью первого порядка теории возмущений и можно пренебрегать обратным влиянием поля излучения на атомную систему. Однако когда время жизни атома в возбужденном состоянии становится малым, то следует принимать во внимание обратное влияние поля излучения на атомную систему. Последнее и приводит к появлению естественной ширины линии излучения атома. Этот процесс можно представить себе наглядно следующим образом. Атом является простой системой, связанной с полем излучения. В свою очередь поле излучения состоит из большого числа гармонических осцилляторов, частоты которых приблизительно равны энергетическому расстоянию между атомными уровнями, деленному на постоянную Планка. Слабая связь между этими системами, частоты которых приблизительно одинаковы, вызывает уширение каждого уровня в целую полосу, ширина которой определяет естественную ширину линии излучения атома. При этом можно проследить и за энергией атома, которая переходит от него к осцилляторам поля излучения. Естественно, что необходимо длительное время для того, чтобы эта энергия перешла от осцилляторов поля обратно к рассматриваемому нами атому. Поэтому, если мы не будем ждать достаточно долго, то ока-

жется, что атом потерял свою энергию, передав ее осцилляторам поля.

Аналогичное явление имеет место и в классической физике. Действительно, если мы устанавливаем слабую связь между двумя классическими осцилляторами одинаковой частоты, то в результате мы получим два осциллятора с новыми частотами (так называемые «нормальные» частоты в системе двух связанных осцилляторов), одна из которых будет немного больше первоначальной частоты осцилляторов, а другая — немного меньше. При этом, если первоначально вся энергия находилась в одном из осцилляторов, то в конце концов за достаточно большой промежуток времени вся энергия переходит в другой осциллятор в силу интерференции колебаний на этих двух новых различных частотах. Если теперь связь между осцилляторами убрать прежде, чем эта энергия вернется обратно к первому осциллятору, то по отношению к нему дело обстоит так, как если бы имелся некоторый механизм потерь.

Если теперь устанавливается связь между M осцилляторами, имеющими в отсутствие связи одинаковую резонансную частоту, то в такой связанной системе появятся M новых резонансных частот, лежащих в узкой полосе вблизи первоначальной частоты. Энергия, находившаяся первоначально в одном из осцилляторов, за счет взаимодействия между осцилляторами начнет распределяться между всеми другими осцилляторами. Если до того момента, когда эта энергия возвратится обратно, удалить связь, то в этом случае указанный осциллятор потеряет в таком процессе часть своей энергии. Этим процессом определяется некоторый механизм потерь. Нарисованная нами картина физически вполне эквивалентна квантовой системе, состоящей из отдельного атома и взаимодействующих с ним осцилляторов поля излучения.

Для описания потерь в резонаторе будем считать, что одна из мод резонатора играет роль атома в приведенных выше рассуждениях, и рассмотрим связь этой моды с упругими колебаниями в диэлектрике. Эти упругие колебания можно разложить по нормальным типам колебаний кристалла и показать, что их энергия эквивалентна энергии большого числа «упругих» осцилляторов. Эти упругие

колебания могут быть проквантованы точно так же, как квантуются электромагнитные колебания. Кванты упругих колебаний называются фононами и подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна. Поэтому гамильтониан для фононов мы можем написать в виде

$$H_L = \sum_j \hbar \omega_j b_j^\dagger b_j, \quad (7.1)$$

где операторы b_j и b_j^\dagger подчиняются обычным соотношениям коммутации:

$$[b_j, b_k^\dagger] = \delta_{jk}, \quad [b_j, b_k] = [b_j^\dagger, b_k^\dagger] = 0. \quad (7.2)$$

В результате мы можем по аналогии с электромагнитным полем в резонаторе записать энергию упругих волн в кристалле и рассматривать амплитуды этих волн как операторы, которые удовлетворяют соотношениям коммутации (7.2).

Обычно в твердом теле имеется в единице объема около 10^{23} атомов, которые первоначально все имеют одну и ту же частоту упругих колебаний.

Однако когда в твердом теле между этими атомами устанавливается некоторая связь, то все эти одинаковые частоты упругих колебаний изменяются и превращаются в целую полосу различных частот ω_j вблизи первоначальной частоты. Сумма по всем таким различным частотам ω_j и указана в выражении (7.1), причем индекс j пробегает в пределах одной полосы интервал целочисленных значений от 1 до 10^{23} . Если все эти частоты расположены очень близко друг к другу с плотностью $\rho(\omega_j)$ *, то суммы по индексу j , когда это удобно, могут быть заменены интегралами.

Если твердое тело находится в тепловом равновесии с окружающими телами при положительной температуре T , то распределение упругих типов колебаний по возбужденным состояниям будет подчиняться распределению Больцмана. Тогда ансамбль затухающих осцилляторов будет описываться в момент времени $t = 0$ известным

*) Не путать $\rho(\omega_j)$ с оператором плотности. (Прим. перев.)

оператором плотности:

$$\rho_L(0) = \frac{\exp(-\beta H_L)}{\text{Sp} [\exp(-\beta H_L)]} = \frac{\exp\left(-\sum_j \beta \hbar \omega_j b_j^\dagger b_j\right)}{\text{Sp} \left[\exp\left(-\sum_j \beta \hbar \omega_j b_j^\dagger b_j\right)\right]}, \quad (7.3)$$

где $\beta^{-1} = kT$.

Так как операторы b_j, b_j^\dagger коммутируют, если $j \neq k$, т. е. $[b_j, b_k^\dagger] = 0$, то мы можем преобразовать соотношение (7.3) и записать

$$\rho_L(0) = \prod_{j=1}^N \rho_j(0), \quad (7.4)$$

где N — число атомов, а

$$\rho_j(0) = (1 - e^{-\lambda_j}) e^{-\lambda_j b_j^\dagger b_j}, \quad (7.5)$$

$$\lambda_j = \frac{\hbar \omega_j}{kT}. \quad (7.6)$$

Таким образом, фононы эквивалентны ансамблю гармонических осцилляторов, находящихся в тепловом равновесии с некоторым резервуаром тепла температуры T .

Предположим теперь, что твердое тело находится в электромагнитном поле резонатора, которое имеет вид одной моды резонатора с частотой ω , близкой к частотам ω_j , т. е. $\omega \approx \omega_j$. Перед тем, как ввести связь между этими двумя квантовыми системами, т. е. между ансамблем упругих колебаний (фононы) и модой электромагнитного колебания резонатора (фотон), запишем гамильтониан невзаимодействующих систем. Он имеет вид

$$H_0 = \hbar \omega a^\dagger a + \sum_j \hbar \omega_j b_j^\dagger b_j, \quad (7.7)$$

где $[a, a^\dagger] = 1$, $[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0$ и все операторы a коммутируют со всеми операторами b . Причем здесь операторы b_j и b_j^\dagger являются операторами соответственно уничтожения и рождения фонона частоты ω_j . Этот гамильтониан описывает состояние системы, когда мода

резонатора (электромагнитное поле) и моды колебаний решетки (упругое поле) не связаны друг с другом. Мы будем считать, что совокупность гармонических осцилляторов поля излучения описывается в момент времени $t = 0$ оператором плотности $\rho_f(0)$, а совокупность упругих колебаний в тот же момент времени описывается, как мы уже видели, оператором плотности $\rho_L(0)$. Явный вид оператора $\rho_f(0)$ будет установлен нами несколько позднее.

Для того чтобы между электромагнитным полем и упругими колебаниями решетки происходил обмен энергией, необходимо в гамильтониан системы добавить член, учитывающий связь между этими двумя подсистемами. Для ионного кристалла такая связь может возникать за счет взаимодействия заряженных ионов с электромагнитным полем. Очевидно, что существуют и другие механизмы, которые могут быть ответственны за установление такой связи (например, кристалл может иметь различные диполи, которые также взаимодействуют с электромагнитным полем). Простейший гамильтониан взаимодействия, который сохраняет полную энергию системы, можно записать в виде

$$H_1 = \sum_j \hbar (k_j a^+ b_j + k_j^* a b_j^+). \quad (7.8)$$

Коэффициенты связи k_j считаются малыми по сравнению с частотами ω и ω_j и зависят от параметров тех физических процессов, которые реально ответственны за механизм связи. Такими параметрами могут быть, например, заряд иона или дипольные моменты атомов кристалла. Кроме того, введенные выше феноменологически члены, ответственные за связь между двумя подсистемами, имеют резонансный характер, т. е. они очень сильно связывают только те фононы, частоты ω_j которых близки к частоте ω рассматриваемой моды резонатора. Физически это условие достаточно очевидно, если исходить из той картины взаимодействия осцилляторов, которая была обрисована выше.

Приведенный выше гамильтониан H_1 эрмитов. Однако возникает вполне естественный вопрос: почему члены вида

$$k_j a^+ b_j^+ + k_j^* a b_j, \quad (7.9)$$

которые также эрмитовы и имеют ту же самую величину связи, что и члены в (7.8), не были включены в гамильтониан взаимодействия (7.8)? Вообще говоря, эти члены могут быть включены в гамильтониан H_1 . Но можно показать, что вклад от них в реальное взаимодействие между двумя подсистемами будем малым. Действительно, если между двумя подсистемами нет никакой связи, то из выражений (7.7) следует, что в отсутствие связи

$$a(t) = ae^{-i\omega t}, \quad b_j(t) = b_j e^{-i\omega_j t}.$$

Когда включается связь, то величины a и b_j в правых частях этих равенств становятся функциями времени. Однако если величина связи мала, т. е. $k_j \ll \omega_j \approx \omega$, то a и b_j будут медленно меняющимися функциями времени. В силу этого такой член в гамильтониане взаимодействия, как $a^+(t) b_j^+(t)$, будет пропорционален $\exp [i(\omega + \omega_j)t] \approx \exp (2i\omega_j t)$, а член вида ab_j^+ — пропорционален

$$\exp [i(\omega_j - \omega)t] \approx 1.$$

Это значит, что члены в выражении (7.8) с течением времени остаются приблизительно постоянными, а члены вида (7.9) очень быстро осциллируют. В связи с тем, что взаимодействие между двумя подсистемами происходит в течение большого числа периодов колебаний с частотой ω_j , члены вида (7.9) будут при усреднении давать нуль. Поэтому мы для простоты будем пренебрегать в гамильтониане взаимодействия H_1 членами вида (7.9). Следует, однако, заметить, что, когда связь становится достаточно сильной, пренебрежение членами вида (7.9) не всегда является оправданным (ибо при сильной связи решения, которые приводят в (7.9) к $\exp (2i\omega_j t)$, могут отсутствовать вообще).

В результате этих обсуждений мы можем перейти к математической постановке задачи. Пусть взаимодействие включается в момент времени $t = 0$, а гамильтониан для одной моды резонатора, взаимодействующей со многими осцилляторами потерь (фононами), имеет вид

$$H = H_0 + H_1 =$$

$$= \hbar\omega a^+ a + \sum_j \hbar\omega_j b_j^+ b_j + \sum_j \hbar(k_j a^+ b_j + k_j^* a b_j^+). \quad (7.10)$$

Этот гамильтониан описывает влияние поля излучения на осцилляторы потерь, а также и обратное влияние осцилляторов потерь (фононов) на поле излучения. Формально такое взаимодействие аналогично взаимодействию двухуровневого атома с полем излучения, которое уже обсуждалось в гл. V. Поэтому мы надеемся, что такое взаимодействие будет достаточно хорошо описывать механизм потерь для моды резонатора и в то же время будет достаточно удовлетворительно объяснять ширину линии резонатора.

7.3. Уравнения движения аттенюатора

Полученный нами гамильтониан (7.10) описывает систему связанных гармонических осцилляторов, в которой только один осциллятор, который характеризует моду поля резонатора (фотон), связывается с другими осцилляторами (фононами). Мы же будем интересоваться статистическими свойствами целой совокупности таких систем. В частности, нас интересуют в основном статистические свойства поля излучения, а не поведение осцилляторов потерь. Именно поэтому мы будем в дальнейшем вычислять характеристическую функцию для электрических и магнитных полей в резонаторе. Однако такие вычисления гораздо более удобно производить в представлении Гейзенберга. Поэтому мы должны знать решения уравнений для операторов $a(t)$ и $a^+(t)$ в форме Гейзенберга.

Можно получить эти уравнения, если исходить из полученного нами гамильтониана и воспользоваться при этом соответствующими соотношениями коммутации. Нетрудно видеть, что эти уравнения движения для операторов $a(t)$ и $b_j(t)$ имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{da}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [a, H] = -i\omega a - i \sum_j k_j b_j, \\ \frac{db_j}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [b_j, H] = -i\omega_j b_j - ik_j^* a. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Эту бесконечную систему связанных уравнений невозможно решить точно, и мы для ее решения воспользуемся в дальнейшем приближении Вигнера—Вайскопфа, рассмотренным нами в гл. V.

Однако прежде чем переходить к решению этой системы, мы получим некоторые полезные свойства этих решений. Так как нас интересует характеристическая функция, описывающая поле излучения для некоторой моды резонатора, то мы не будем детально исследовать операторы $b_j(t)$ и $b_j^+(t)$, описывающие поведение осцилляторов потерь (фононов). Очевидно, что в этом случае нам необходимо вычислять характеристическую функцию для выражений вида

$$A(t) = \alpha a(t) + \alpha^* a^+(t).$$

Кроме того, так как уравнения (7.11) линейны по операторам a и b_j , то решение этой системы для оператора $a(t)$ в общем случае должно иметь вид

$$a(t) = u(t)a + \sum_j v_j(t)b_j, \quad (7.12)$$

где a и b_j являются операторами в представлении Шредингера, ибо они не зависят явно от времени. Решение вида (7.12) логически вытекает из системы уравнений (7.11), если последнюю записать в матричной форме. Введем для этого матрицы вида

$$A(t) = \begin{bmatrix} a(t) \\ b_1(t) \\ b_2(t) \\ \dots \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} \omega & k_1 & k_2 & \dots \\ k_1^* & \omega_1 & 0 & \dots \\ k_2^* & 0 & \omega_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \quad (7.13)$$

Тогда систему (7.11) можно записать в следующей форме уравнения для матриц:

$$\frac{dA}{dt} = -iKA, \quad (7.14)$$

которое имеет формальное решение вида

$$A(t) = e^{-iKt} A(0), \quad (7.15)$$

ибо матрица K не зависит от времени. Из последнего выражения следует, что оператор $a(t)$ принимает вид (7.12).

Далее, поскольку соотношение коммутации для операторов $a(t)$ и $a^+(t)$,

$$[a(t), a^+(t)] = 1, \quad (7.16)$$

должно выполняться для любого момента времени, то отсюда и из выражения (7.12) вытекает, что функции $u(t)$ и $v_j(t)$ должны быть связаны между собой соотношением

$$|u(t)|^2 + \sum_j |v_j(t)|^2 = 1, \quad (7.17)$$

ибо $[a, b_j] = 0$, $[a, b_j^+] = 0$ и т. п.

Соотношение (7.17) окажется впоследствии весьма полезным при упрощении некоторых результатов.

В принципе мы могли бы получить вид функций $u(t)$ и $v_j(t)$ путем разложения в степенной ряд равенства (7.15). Это разложение было бы эквивалентно ряду теории возмущений по постоянной связи k_j . К сожалению, эти ряды обладают очень плохой сходимостью для того, чтобы их можно было плодотворно использовать в конкретных расчетах. Поэтому мы используем для нахождения функций $u(t)$ и $v_j(t)$ метод Вигнера—Вайскопфа. Детали вычислений по этому методу формально аналогичны тем вычислениям, которые были проделаны в гл. V при расчете естественной ширины линии излучения. Поэтому за конкретными вычислениями в данном случае мы отсылаем читателя к приложению З, где найдено, что

$$u(t) \approx \exp\left(-\frac{\gamma}{2}t - i\omega't\right), \quad (7.18)$$

$$v_j(t) \approx \frac{k_j e^{-i\omega_j t} \{1 - \exp[i(\omega_j - \omega')t - (\gamma/2)t]\}}{\omega_j - \omega' + i(\gamma/2)}, \quad (7.19)$$

где γ — параметр потерь, определяемый соотношением

$$\gamma = 2\pi k^2(\omega) \rho(\omega), \quad (7.20)$$

$$\omega' = \omega + \Delta\omega. \quad (7.21)$$

Здесь малый частотный сдвиг $\Delta\omega$ определяется по формуле

$$\Delta\omega = -\mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|k_k|^2 \rho(\omega_k) d\omega_k}{\omega_k - \omega} \right\} \quad (7.22)$$

(\mathcal{P} — символ главного значения интеграла), а множитель $\rho(\omega)$ учитывает форму линии для осцилляторов потерь (его не следует путать с оператором плотности).

В качестве упражнения предлагаем читателю проверить, что эти приближенные выражения для $u(t)$ и $v_j(t)$ удовлетворяют условию (7.17). Это в то же время будет и дополнительной проверкой внутренней согласованности (непротиворечивости) тех приближений, которые используются в Приложении 3 при выводе формул (7.18) и (7.19). Очевидно, что в рамках сделанных приближений соотношение (7.17) должно выполняться в течение того интервала времени, пока не нарушаются соотношения неопределенностей.

Из выражений (7.18) и (7.19) нетрудно увидеть, что, когда величина $|u(t)|^2$ уменьшается с течением времени, осцилляторы потерь (фононы) возвращают эту энергию обратно в эту моду излучения резонатора. При этом автоматически в каждый момент времени выполняются соотношения коммутации. Как отмечалось ранее, соотношения коммутации нарушались, если частота ω просто заменялась на $\omega + i(\gamma/2)$.

7.4. Характеристическая функция аттенуатора. Полуширина линии резонатора

В гл. VI мы видели, что статистические свойства излучения в резонаторе с потерями могут быть получены с помощью вычисления характеристической функции для совокупности систем, представленных в момент времени $t = 0$ оператором плотности $\rho(0)$. Этот оператор плотности описывает состояние аттенуатора в начальный момент времени $t = 0$. Вычислим характеристическую функцию для оператора $A(t)$ в представлении Гейзенберга. Этот оператор имеет вид

$$A(t) = \alpha a(t) + \alpha^* a^+(t). \quad (7.23)$$

При этом, если $\alpha = \alpha_q = \sqrt{\hbar/2\omega}$, то оператор $A(t) = q(t)$ соответствует магнитному полю, а если $\alpha = \alpha_p = -i\sqrt{\hbar\omega/2}$, то оператор $A(t) = p(t)$ соответствует электрическому полю внутри резонатора.

Характеристическая функция для оператора A в представлении Гейзенберга в соответствии с результатами гл. VI имеет вид

$$C_A(\xi) = \text{Sp}(\rho(0) \exp\{i\xi[\alpha a(t) + \alpha^* a^+(t)]\}). \quad (7.24)$$

Оператор плотности $\rho(0)$ в момент времени $t = 0$ можно записать в виде обычного произведения оператора $\rho_f(0)$, описывающего начальное состояние поля в резонаторе, и оператора $\rho_L(0)$, описывающего начальное состояние осцилляторов потерь и определяемого формулой (7.4), т. е.

$$\rho(0) = \rho_f(0) \rho_L(0). \quad (7.25)$$

Это возможно сделать потому, что до момента $t = 0$ между осцилляторами поля излучения в резонаторе и осцилляторами потерь не было никакого взаимодействия — связь между ними включается в момент времени $t = 0$.

Если использовать выражение (7.12) и ему комплексно сопряженное, то экспоненту в формуле (7.24) можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \exp \{i\xi [\alpha a(t) + \alpha^* a^\dagger(t)]\} = \\ & = \exp [i\xi (\alpha u a + \alpha^* u^* a^\dagger)] \prod_j \exp [i\xi (\alpha v_j b_j + \alpha^* v_j^* b_j^\dagger)], \end{aligned} \quad (7.26)$$

ибо все операторы a и b в правой части равенства, которые являются операторами в представлении Шредингера в момент времени $t = 0$, коммутируют между собой. Для сокращения записи в (7.26) величины $u(t)$ и $v_j(t)$ записываются в виде u и v_j .

Если теперь воспользоваться формулами (7.25) и (7.26), то можно записать характеристическую функцию в виде произведения двух сомножителей:

$$C_A(\xi) = F \cdot L, \quad (7.27)$$

где

$$\begin{aligned} F &= \text{Sp } \rho_f(0) \exp [i\xi (\alpha u a + \alpha^* u^* a^\dagger)], \\ L &= \prod_j L_j \equiv \prod_j \text{Sp } \rho_j(0) \exp [i\xi (\alpha v_j b_j + \alpha^* v_j^* b_j^\dagger)]. \end{aligned} \quad (7.28)$$

В первый сомножитель F входят операторы поля в резонаторе (хотя влияние потерь учитывается обычной функцией $u(t)$), а во второй сомножитель L входят только операторы потерь b_j .

Сначала мы рассмотрим величины L_j , ибо они уже были вычислены в гл. VI. Для этого используем выражение

(7.5) и вычислим след оператора ρ_j в выражении для L_j в представлении, в котором оператор $b_j^\dagger b_j$ диагонален. Тогда получим

$$L_j = (1 - e^{-\lambda_j}) \times \\ \times \sum_{n_j=0}^{\infty} e^{-\lambda_j n_j} \langle n_j | \exp [i\xi (\alpha v_j b_j + a^* v_j^* b_j^\dagger)] | n_j \rangle, \quad (7.29)$$

где $b_j^\dagger b_j |n_j\rangle = n_j |n_j\rangle$. По внешнему виду это выражение совпадает с выражением (6.112), если только в последнем заменить операторы a, a^\dagger на операторы b, b^\dagger , а также произвести замену $\lambda \rightarrow \lambda_j, \alpha \rightarrow \alpha v_j, \alpha' \rightarrow \alpha^* v_j^*$ и $n \rightarrow n_j$. Тогда результат вычислений определяется формулами (6.117) и (6.118) и в новых обозначениях будет иметь вид

$$L_j = e^{-1/2 \xi^2 \mu_j}, \quad (7.30)$$

где

$$\mu_j(t) = |\alpha|^2 |v_j(t)|^2 \operatorname{cth} 1/2 \lambda_j, \quad \lambda_j = \frac{\hbar \omega_j}{kT}. \quad (7.31)$$

В результате выражение для $L = \prod_j L_j$ принимает вид

$$L = \prod_j L_j = \exp \left[-1/2 |\alpha|^2 \xi^2 \sum_j |v_j(t)|^2 \operatorname{cth} 1/2 \lambda_j \right]. \quad (7.32)$$

Для суммы, стоящей в экспоненте, можно получить приближенное выражение. Из формулы (7.19) видно, что величина $|v_j(t)|^2$ имеет заметный максимум при $\omega_j \approx \omega'$, ибо параметр потерь γ является малой величиной. Так как при этом $\operatorname{cth} (\hbar \omega_j / 2kT)$ является медленно меняющейся функцией частоты ω_j , то его можно вынести из-под знака суммы, заменяя при этом частоты ω_j на частоту ω' . В результате, если используем соотношение (7.17), получим

$$\sum_j |v_j(t)|^2 \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega_j}{2kT} \approx \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega'}{2kT} \sum_j |v_j(t)|^2 = \\ = \operatorname{cth} \frac{\hbar \omega'}{2kT} [1 - |u(t)|^2]. \quad (7.33)$$

Подставив в (7.33) приближенное выражение (7.18) для функции $u(t)$, получим

$$L \approx \exp \left[-|\alpha|^2 \xi^2 (1 - e^{-\gamma t}) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^\lambda - 1} \right) \right], \quad (7.34)$$

где

$$\lambda = \hbar\omega/kT. \quad (7.35)$$

Для того, чтобы получить явный вид функции F , необходимо точно задать состояние поля излучения в резонаторе в начальный момент времени $t = 0$, т. е. задать конкретный вид оператора плотности $\rho_f(0)$. Ниже мы рассмотрим несколько частных случаев.

1. Состояние вакуума. Тепловой шум. Предположим, что с помощью некоторого количества измерений было установлено, что состояние поля излучения в резонаторе в момент времени $t = 0$ является состоянием вакуума. Это означает, что в момент времени $t = 0$ поле излучения в резонаторе находится в чистом состоянии $|0\rangle$. В этом случае оператор плотности для совокупности таких систем равен

$$\rho_f(0) = |0\rangle\langle 0|. \quad (7.36)$$

Тогда множитель F в выражении (7.28) примет вид

$$\begin{aligned} F &= \langle 0 | e^{i\xi(\alpha a + \alpha^* u^* a^+)} | 0 \rangle = \\ &= \exp \left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2 |u|^2 \xi^2 \right) \langle 0 | e^{i\xi \alpha^* u^* a^+} e^{i\xi \alpha a} | 0 \rangle = \\ &= \exp \left[-\frac{1}{2} |\alpha|^2 |u(t)|^2 \xi^2 \right]. \end{aligned} \quad (7.37)$$

При вычислении величины F оператор $\exp [i\xi(\alpha a + \alpha^* u^* a^+)]$ записывается в нормальной форме. Если мы теперь используем приближенное выражение (7.18) для функции $u(t)$, то можем привести функцию F к виду

$$F = \exp \left(-\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 e^{-\gamma t} \right). \quad (7.38)$$

Заметим, что функция F , так же как и функция L , квадратично зависит от параметра ξ .

Используя выражения (7.34) для величины L и (7.38) для функции F , мы можем получить для характеристической функции $C_A(\xi)$ следующее окончательное

выражение:

$$C_A(\xi) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 \left[e^{-\gamma t} + (1 - e^{-\gamma t}) \left(1 + \frac{2}{e^\lambda - 1} \right) \right] \right\}. \quad (7.39)$$

Первое слагаемое в экспоненте, уменьшающееся со временем, соответствует переходу энергии от поля излучения в резонаторе к осцилляторам потерь. Второе слагаемое, растущее со временем, соответствует обратному потоку энергии от осцилляторов потерь к моде излучения резонатора.

При абсолютном нуле температуры ($\lambda \rightarrow \infty$) характеристическая функция существенно упрощается:

$$C_A(\xi) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 [e^{-\gamma t} + (1 - e^{-\gamma t})] \right\} = \\ = \exp \left(-\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 \right). \quad (7.40)$$

Именно эта характеристическая функция и учитывает влияние нулевых колебаний поля внутри резонатора.

Мы намного лучше поймем смысл и значение характеристической функции, если вычислим с помощью функции (7.39) моменты операторов p и q . Если $\alpha = \alpha_p$ или $\alpha = \alpha_q$, то путем простого дифференцирования мы можем получить

$$\langle p \rangle = \langle q \rangle = 0. \quad (7.41)$$

Это значит, что среднее значение поля в резонаторе в любой момент времени t равно нулю. В начальный момент времени $t = 0$ внутри резонатора не было никакого поля (состояние вакуума). Тепловая энергия от осцилляторов потерь с течением времени переходит в поле излучения резонатора. Однако при этом средние значения поля в любой момент времени t все равно остаются равными нулю при любой температуре осцилляторов потерь.

С помощью вторых моментов операторов p и q мы можем вычислить среднюю энергию поля в резонаторе:

$$\langle E \rangle = \hbar \omega (\langle a^\dagger a \rangle + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} (\langle p^2 \rangle + \omega^2 \langle q^2 \rangle) = \\ = \hbar \omega \left[\frac{1 - e^{-\gamma t}}{e^\lambda - 1} + \frac{1}{2} e^{-\gamma t} + \frac{1}{2} (1 - e^{-\gamma t}) \right] = \\ = \hbar \omega \left(\frac{1 - e^{-\gamma t}}{e^\lambda - 1} + \frac{1}{2} \right). \quad (7.42)$$

Из второго выражения для $\langle E \rangle$ видно, что для того, чтобы энергия нулевого поля все время оставалась постоянной и равной $\hbar\omega/2$, необходимо, чтобы в любой момент времени t имел место баланс между энергией, вытекающей в резонатор, и энергией, вытекающей из него. При абсолютном нуле температуры ($\lambda \rightarrow \infty$) средняя энергия $\langle E \rangle$ стремится к нулевой энергии поля в резонаторе, равной $\hbar\omega/2$.

Хотя средние значения $\langle p \rangle = \langle q \rangle = 0$, средние значения квадратов амплитуд поля $\langle p^2 \rangle$ и $\langle q^2 \rangle$ отличны от нуля. Как мы видели раньше, эти среднеквадратичные флуктуации называются нулевыми колебаниями поля.

В силу соотношения (7.42) среднее число квантов в резонаторе в момент времени t равно

$$\bar{n} = \langle a^+ a \rangle = \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \rightarrow \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}. \quad (7.43)$$

Иными словами, если поле излучения в резонаторе из состояния вакуума в момент времени $t = 0$ постепенно переходит к тепловому равновесию с осцилляторами потерь, то распределение излучения внутри резонатора переходит в распределение Планка для излучения абсолютно черного тела. Приведенные выше расчеты показывают, что это стремление во времени к равновесному распределению Планка осуществляется по экспоненциальному закону.

Для того чтобы подчеркнуть этот момент, мы подведем итог всем полученным результатам и нарисуем качественную картину развития процесса во времени. В начальный момент времени внутри резонатора нет никакого поля. Мы имеем в этот момент состояние вакуума, но с отличными от нуля нулевыми колебаниями. Далее, при $t > 0$ устанавливается некоторая связь между этим резонатором и системой упругих колеблющихся осцилляторов (осцилляторы потерь), находящихся в тепловом равновесии при температуре T . Осцилляторы начинают передавать часть энергии в поле излучения внутри резонатора, а оттуда она частично возвращается обратно к упругим осцилляторам. Этот процесс продолжается до тех пор, пока поле излучения внутри резонатора не приходит в тепловое равновесие с системой упругих осцилляторов. Совпадение распределения равновесного излучения с рас-

пределением Планка еще раз подтверждает справедливость многих приближений, сделанных при расчетах. Энергия, запасенная таким образом внутри резонатора, называется тепловым шумом. Источником такого теплового шума внутри резонатора является спонтанное излучение фононов в решетке.

2. Состояние с минимальной неопределенностью. В качестве следующего простейшего примера рассмотрим возбуждение одной моды резонатора сигналом в момент времени $t = 0$. При этом мы предполагаем, что состояние поля внутри резонатора в момент времени $t = 0$ описывается оператором плотности чистого состояния, приведенным в формуле (6.96),

$$\rho_1(0) = \exp(-\bar{n}) e^{w^* a^\dagger} |0\rangle \langle 0| e^{w a}, \quad (7.44)$$

где \bar{n} есть среднее число квантов ν резонаторе в момент времени $t = 0$, средние электрические и магнитные поля в момент времени $t = 0$ определяются выражениями

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= i \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2}} (w^* - w), \\ \langle q \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2}} (w^* + w) \end{aligned} \quad (7.45)$$

и

$$w = \sqrt{\bar{n}} e^{i\phi}. \quad (7.46)$$

Распределение вида (7.44) с максимальной точностью, допускаемой принципом неопределенности, определяет электрическое и магнитное поля внутри резонатора. Мы же интересуемся теперь поведением этих полей во времени, начиная с того момента, когда устанавливается связь между модой резонатора и упругими осцилляторами потерь (фононами).

В нашем случае множитель F в формуле (7.27) принимает вид

$$F = e^{-\bar{n}} \langle 0 | e^{w a} \exp[i\xi(\alpha u a + \alpha^* u^* a^\dagger)] e^{w^* a^\dagger} | 0 \rangle. \quad (7.47)$$

По внешнему виду это выражение совпадает с выражением (6.97), если мы в последнем произведем замену $\alpha \rightarrow \alpha u$ и $\alpha^* \rightarrow \alpha^* u^*$. Поэтому в силу соотношения (6.99) для

величины F можно получить следующее выражение:

$$F = \exp \left[-\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 |u|^2 + i \xi (\alpha^* u^* w + \alpha u w^*) \right]. \quad (7.48)$$

Если $\bar{n} \rightarrow 0$, то $w \rightarrow 0$, и состояние (7.44) переходит в состояние вакуума. В этом случае выражение (7.48) автоматически переходит в формулу (7.37). Наличие множителя ξ^2 в приведенных выше выражениях все еще обуславливается влиянием на процесс флуктуаций нулевого поля. Естественно, что этот множитель не зависит от величины сигнала внутри резонатора.

Явный вид характеристической функции при наличии в системе одновременно сигнала и гауссова шума можно получить из формулы (7.27), если в нее подставить выражения (7.34) и (7.48):

$$C_A(\xi) = \exp \left[i \xi (\alpha^* u^* w + \alpha u w^*) - \frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 |u|^2 - \xi^2 |\alpha|^2 (1 - e^{-\gamma t}) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\lambda} - 1} \right) \right]. \quad (7.49)$$

Отсюда можно обычным способом получить выражения для нескольких первых моментов операторов p и q . Например,

$$\langle q \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar\bar{n}}{\omega}} e^{-1/2\gamma t} \cos(\omega t + \varphi), \quad (7.50)$$

$$\langle p \rangle = -\sqrt{2\hbar\omega\bar{n}} e^{-1/2\gamma t} \sin(\omega t + \varphi).$$

При вычислении этих выражений мы использовали соотношения (7.18) и (7.46). Кроме того, можно получить формулы и для вторых моментов:

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 &= \hbar\omega \left[\frac{1}{2} + \frac{1 - e^{-\gamma t}}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \right] = \\ &= \omega^2 [\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2]. \end{aligned} \quad (7.51)$$

Следовательно, начальный сигнал распадается за то же самое время, в течение которого развивается внутри резонатора тепловой шум. Формулы (7.50) показывают, что время жизни сигнала в одной моде резонатора равно γ^{-1} . Если мы теперь разложим (7.50) в интеграл Фурье,

то получим, что

$$q(\omega_0) = \sqrt{\frac{\hbar \bar{n}}{2\omega}} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\gamma/2 + i(\omega_0 - \omega')} . \quad (7.52)$$

Отсюда следует, что интенсивность поля внутри резонатора $I(\omega_0)$, пропорциональная величине $|q(\omega_0)|^2$, имеет вид

$$I(\omega_0) \approx |q(\omega_0)|^2 = \frac{\hbar \bar{n}}{8\pi^2\omega} \frac{1}{(\omega_0 - \omega')^2 + (\gamma/2)^2} , \quad (7.53)$$

т. е. линия излучения имеет типичную лоренцеву форму с полушириной

$$B = \gamma . \quad (7.54)$$

Мы видим, что осцилляторы потерь объясняют квантовомеханически ширину полосы линии моды резонатора. С помощью приведенных в конце этой главы задач 7.1 и 7.2 можно показать, каким образом обеспечивается непрерывная подача сигнала в моду резонатора и как получаются условия для стационарного состояния. Результаты этих задач согласуются с формулой (7.53), которая является типичной классической формулой.

7.5. Модель мазера

Во введении к этой главе было дано краткое теоретическое объяснение принципа работы мазера. В сущности, для создания мазера необходима соответствующая квантовая система с двумя энергетическими уровнями, которая будет связываться с полем внутри резонатора. Если в верхнем состоянии находится большее число таких квантовых систем, чем в нижнем состоянии, то сигнал будет усиливаться. Ниже мы рассмотрим очень простую модель мазера с требуемыми характеристиками.

Предположим, что резонатор работает на одном типе колебаний, имеющем частоту ω . Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H_f = \hbar\omega a^\dagger a . \quad (7.55)$$

Состояние поля в резонаторе в начальный момент времени $t = 0$ описывается оператором плотности $\rho_f(0)$. Предположим также, что в небольшом объеме резонатора имеется вещество, состоящее из большого числа N частиц со

спином $1/2$, которые до того, как начинают взаимодействовать с полем излучения, находятся в тепловом равновесии при температуре T и распределены по состояниям согласно распределению Больцмана. Если температура системы спинов положительна, то спины будут в основном поглощать излучение, тогда как если температура системы спинов отрицательна, то они будут дополнительно излучать энергию в поле излучения [42]. Будем предполагать, что система спинов находится во внешнем постоянном магнитном поле H_0 , направленном вдоль оси z . Тогда, как мы видели в гл. V, гамильтониан системы спинов до начала взаимодействия с полем резонатора имеет вид

$$H_s = \frac{\hbar}{2} \sum_{j=1}^N \omega_j \sigma_j^z. \quad (7.56)$$

Здесь σ_j^z — спиновый оператор Паули для j -го спина. Резонансная частота ω_j j -го спина системы зависит от постоянного магнитного поля, в котором находится j -й спин и которое может меняться от спина к спину в силу наличия локальных полей.

Систему спинов можно рассматривать как систему, находящуюся в тепловом равновесии при температуре T_s и описываемую оператором плотности $\rho_s(0)$ системы невзаимодействующих частиц:

$$\rho_s(0) = \prod_j \rho_j(0), \quad (7.57)$$

где

$$\rho_j(0) = \frac{\exp(-1/2\lambda_j\sigma_j^z)}{\text{Sp}[\exp(-1/2\lambda_j\sigma_j^z)]} \quad (7.58)$$

и

$$\lambda_j = \frac{\hbar\omega_j}{kT_s}. \quad (7.59)$$

Температура T_s может быть как положительной, так и отрицательной.

Интересно теперь вычислить ожидаемое среднее значение оператора σ_j^z в момент времени $t = 0$. Оно имеет вид

$$\langle \sigma_j^z \rangle = \text{Sp} \rho_j(0) \sigma_j^z. \quad (7.60)$$

Вычислим этот след в представлении, в котором матрица σ_j^z диагональна, т. е. когда $\sigma_j^z | \pm 1 \rangle = \pm 1 | \pm 1 \rangle$. Тогда мы получим

$$\langle \sigma_j^z \rangle = \frac{e^{-1/2\lambda_j} - e^{1/2\lambda_j}}{e^{-1/2\lambda_j} + e^{1/2\lambda_j}} = -\operatorname{th} \frac{\hbar\omega_j}{2kT_s}. \quad (7.61)$$

Если температура T_s отрицательна, то величина $\langle \sigma_j^z \rangle$ положительна.

Отношение количества спинов в верхнем состоянии к количеству спинов в нижнем состоянии имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\langle +1 | \sigma_j^z \rho_j | +1 \rangle}{\langle -1 | \sigma_j^z \rho_j | -1 \rangle} &= \\ &= \frac{\langle +1 | \sigma_j^z e^{-1/\lambda_j \sigma_j^z} | +1 \rangle}{\langle -1 | \sigma_j^z e^{-1/2\lambda_j \sigma_j^z} | -1 \rangle} = \exp \left(-\frac{\hbar\omega_j}{kT_s} \right). \end{aligned} \quad (7.62)$$

Отсюда видно, что если температура T_s отрицательна, то в верхнем состоянии будет находиться больше спинов, чем в нижнем состоянии.

Для того чтобы получить инверсию населенности (и отрицательную температуру T_s), достаточно включить в нашу схему некоторый механизм накачки [42]. Как отмечалось ранее, это совсем нетрудно и поэтому не представляет особого интереса в нашей задаче.

После всего этого предположим, что в момент времени $t = 0$ поле излучения начинает взаимодействовать со спинами, т. е. между ними возникает некоторая связь. Согласно гл. V член взаимодействия можно записать в виде

$$H_1 = \sum_j \hbar k_j (\sigma_j^+ a + \sigma_j^- a^+).$$

Здесь величина k_j является постоянной связи для j -го спина, а σ_j^\pm — операторы Паули для j -го спина.

В результате полный гамильтониан для мазера имеет вид

$$H = \hbar\omega a^+ a + \frac{1}{2} \sum_j \hbar\omega_j \sigma_j^z + \sum_j \hbar k_j (\sigma_j^+ a + \sigma_j^- a^+). \quad (7.63)$$

При этом мы считаем, что связь между полем излучения и спинами является слабой.

7.6. Мазерные уравнения движения

Следующим шагом в нашем изучении статистических свойств мазера является решение уравнений движения в представлении Гейзенберга. В силу коммутативности операторов спина и бозона нетрудно получить эти уравнения обычным способом. При гамильтониане вида (7.63) они имеют вид

$$\frac{da}{dt} = -i\omega a - i \sum_j k_j \sigma_j^-, \quad (7.64a)$$

$$\frac{d\sigma_j^-}{dt} = -i\omega_j \sigma_j^- + ik_j \sigma_j^z a, \quad (7.64b)$$

$$\frac{d\sigma_j^z}{dt} = -2ik_j (\sigma_j^+ a + \sigma_j^- a^+), \quad (7.64c)$$

$$\frac{d\sigma_j^+}{dt} = +i\omega_j \sigma_j^+ - ik_j \sigma_j^z a^+, \quad (7.64d)$$

$$\frac{da^+}{dt} = i\omega a^+ + i \sum_j k_j \sigma_j^+. \quad (7.64e)$$

Эти уравнения оказываются существенно более сложными, чем уравнения (7.11) для аттенюатора, ибо в правой части появляются нелинейные члены вида $\sigma_j^z a$, $\sigma_j^- a^+$ и т. п. Однако если мы хотим рассматривать модель, описывающую линейный усилитель, то мы должны сделать линейное приближение.

Это линейное приближение состоит в следующем. Пусть в рассматриваемом образце имеется большое число спинов. Для того чтобы выделить энергию из образца, необходимо перевести спины из верхнего состояния в нижнее с одновременным испусканием фотона (при этом изменяется величина σ_j^z). Однако, для того чтобы достигнуть необходимой величины усиления в такой системе, достаточно перевести из верхнего состояния в нижнее лишь небольшое число спинов из общего количества *). Поэтому, если процесс взаимодействия спинов с полем

* Это приближение справедливо лишь вдали от насыщения.
(Прим. перев.)

излучения не будет продолжаться достаточно долго и если величина связи между спинами и полем мала ($k_j \ll \omega_j \approx \approx \omega$), то начальное равновесное тепловое распределение спинов, задаваемое оператором плотности в формулах (7.57) и (7.58), не будет заметно изменяться в течение процесса усиления. Поэтому в уравнениях движения (7.64) операторы σ_j^z можно заменить на их равновесные значения (7.61).

В соответствии с уравнением (7.64с) изменение во времени величины σ_j^z пропорционально величине k_j . Отсюда следует, что член вида $k_j \sigma_j^z a$ в уравнении (7.64b) оказывается порядка k_j^2 *). Поэтому в линейном приближении мы можем заменить величину σ_j^z на $\langle \sigma_j^z \rangle$. Такой метод эквивалентен получению приближенного решения уравнения в виде разложения в ряд по степеням коэффициента связи k_j . В этом случае пары уравнений (7.64а), (7.64b) и (7.64d), (7.64е) оказываются расцепленными между собой, и в результате получается бесконечная система уравнений вида

$$\frac{da}{dt} = -i\omega a - i \sum_j k_j \sigma_j^-, \quad (7.65)$$

$$\frac{d\sigma_j^-}{dt} = -i\omega_j \sigma_j^- + ik_j \langle \sigma_j^z \rangle a.$$

Поскольку уравнения линейны, то решение для оператора $a(t)$ ищем в виде

$$a(t) = u(t) a + \sum_j v_j(t) \sigma_j^-, \quad (7.66)$$

где операторы a и σ_j^- не зависят явно от времени и соответствуют значениям операторов в представлении Шредингера при $t = 0$.

*) Нам кажется, что это утверждение неверно. Точнее нужно сказать, что отклонение величины σ_j^z от среднего равновесного значения $\langle \sigma_j^z \rangle$ в силу линейности приближения будет невелико и порядка k_j . А тогда отличие члена $k_j \sigma_j^z$ от члена $k_j \langle \sigma_j^z \rangle$ будет порядка k_j^2 , что уже есть превышение точности линейного приближения. (Прим. перев.)

Из коммутационных соотношений следует, что

$$[a(t), a^+(t)] = 1 = |u(t)|^2 - \sum_j |v_j(t)|^2 \sigma_j^z, \quad (7.67)$$

ибо $[\sigma_j^+, \sigma_j^-] = \sigma_j^z$. Если теперь в соответствии с линейным приближением заменить в соотношении (7.67) оператор σ_j^z его ожидаемым значением, то получим

$$|u(t)|^2 - \sum_j |v_j(t)|^2 \langle \sigma_j^z \rangle = 1. \quad (7.68)$$

Теперь уравнения (7.65) можно решить с помощью приближения Вигнера—Вайскопфа точно так же, как это делается в Приложении 3 при решении уравнений (7.11). Детали вычислений мы оставляем в качестве упражнения для читателя. Результат же такого решения имеет вид

$$u(t) \approx \exp\left(-i\omega t + \frac{\gamma}{2} \langle \sigma_z \rangle t\right), \quad (7.69)$$

$$v_j(t) = \frac{k_j e^{-i\omega_j t} \{1 - \exp[i(\omega_j - \omega')t + (\gamma/2) \langle \sigma_z \rangle t]\}}{(\omega_j - \omega') - i(\gamma/2) \langle \sigma_z \rangle},$$

где

$$\gamma = 2\pi k^2 (\omega') \rho(\omega'). \quad (7.70a)$$

Величина $\rho(\omega')$ есть плотность спиновых состояний, а $\omega' = \omega + \Delta\omega \langle \sigma_z \rangle$, где малый частотный сдвиг определяется выражением

$$\Delta\omega = \mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho(\omega_j) k_j^2 d\omega_j}{\omega_j - \omega} \right\}, \quad (7.70b)$$

а величина $\langle \sigma_z \rangle$ равна

$$\langle \sigma_z \rangle = -th \frac{\hbar\omega}{2kT_s} = \langle \sigma_j^z \rangle_{\omega_j=\omega}. \quad (7.71)$$

Решения (7.69) для системы частиц со спином 1/2 и решения (7.18) и (7.19) для системы осцилляторов почти формально очень схожи между собой. Главное отличие состоит в появлении в формулах (7.69) дополнитель-

ного члена $\langle \sigma_z \rangle$. Этот член определяется соотношением (7.71) и является функцией температуры спиновой системы. Мы видим, что при положительных температурах функция $u(t)$ в выражениях (7.69) будет экспоненциально уменьшаться с течением времени из-за отрицательности величины $\langle \sigma_z \rangle$. Если же температура спиновой системы T_s окажется отрицательной, то решения будут экспоненциально нарастать с течением времени. Поэтому в зависимости от знака температуры T_s настоящая модель может описывать как аттенюатор, так и усилитель.

7.7. Мазерная характеристическая функция. Шумовая температура

Для получения статистической информации о поле излучения в резонаторе вычислим характеристическую функцию

$$C_A(\xi) = \text{Sp} \{ \rho_f(0) \rho_s(0) e^{i\xi[\alpha a(t) + \alpha^* a^+(t)]} \}.$$

Если воспользоваться выражением (7.66) и ему комплексно сопряженным, то выражение для $C_A(\xi)$ приводится к виду

$$C_A = F \cdot S, \quad (7.72)$$

где

$$F = \text{Sp} [\rho_f(0) e^{i\xi(\alpha u a + \alpha^* u^* a^+)}], \quad (7.73)$$

$$S = \prod_j \text{Sp} [\rho_j(0) e^{i\xi(\alpha v_j \sigma_j^- + \alpha^* v_j^* \sigma_j^+)}].$$

Как и раньше для случая аттенюатора, мы записали характеристическую функцию для мазерной системы в виде простого произведения сомножителей, включающих в себя отдельно операторы поля и отдельно операторы спина.

Для того чтобы вычислить функцию S , мы можем использовать теорему 15 из гл. III (см. (3.179)) и, изменив обозначения, написать

$$S = \prod_j \text{Sp} \left\{ \rho_j(0) \left[\cos(|\alpha v_j| \xi) + \frac{i\xi \sin(|\alpha v_j| \xi)}{|\alpha v_j|} (\alpha v_j \sigma_j^- + \alpha^* v_j^* \sigma_j^+) \right] \right\}. \quad (7.74)$$

Мы знаем, однако, что

$$\text{Sp}' \rho_j (0) = 1 \quad (7.75)$$

и в то же время можно показать, что

$$\text{Sp} \rho_j (0) \sigma_j^{\pm} = 0. \quad (7.76)$$

Поэтому выражение (7.74) приводится к виду

$$S = \prod_j \cos (|\alpha v_j| \xi) \approx \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_j |v_j(t)|^2 |\alpha|^2 \xi^2 \right]. \quad (7.77)$$

Последняя форма записи величины S в выражении (7.77) следует из того, что в силу соотношений (7.69) величина $|v_j(t)|^2$ является малой величиной порядка k_j^2 . Поэтому разложение в степенной ряд косинуса и экспоненты дает одинаковую степень приближения в выражении для S .

В дальнейшем с помощью соотношений (7.68) выражение для S можно упростить. Действительно, поскольку величина γ мала, то из формул (7.69) следует, что функция $|v_j(t)|^2$ имеет заметный максимум вблизи $\omega_j \approx \omega$. Так как величины $\langle \sigma_j^z \rangle^{\dagger}$ являются медленно меняющимися функциями ω_j , то можно положить в них $\omega_j = \omega$ и после этого вынести их из-под знака суммы в соотношении (7.67). Тогда выражение (7.68) с помощью соотношений (7.69) приводится к виду

$$\sum_j |v_j|^2 \approx \frac{|u|^2 - 1}{\langle \sigma_z \rangle} = \frac{\exp(\gamma \langle \sigma_z \rangle t) - 1}{\langle \sigma_z \rangle}. \quad (7.78)$$

В результате выражение для функции S приводится к виду

$$S \approx \exp \left\{ -\xi^2 |\alpha|^2 [1 - \exp(\gamma \langle \sigma_z \rangle t)] \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT_s) - 1} \right) \right\}. \quad (7.79)$$

Для получения (7.79) была использована формула (7.74).

Последнее выражение по внешнему виду тождественно совпадает с формулой (7.34) для величины L — оператора потерь. Более того, так как множитель F в виде (7.73) для характеристической функции совпадает по форме с выражением (7.28) для аттенуатора, то отсюда следует, что статистические свойства усилителя одинаковы со

статистическими свойствами аттенюатора. В частности, когда начальное состояние поля является состоянием вакуума, то среднее количество квантов шума в момент времени t равно

$$\langle a^+a \rangle = \frac{G - 1}{1 - \exp(\hbar\omega/kT_s)}, \quad (7.80)$$

где мы положили

$$G = \exp(\gamma \langle \sigma_z \rangle t), \quad (7.81)$$

а величина $\langle \sigma_z \rangle$ определяется формулой (7.71). Если температура T_s положительна, то величина $\langle \sigma_z \rangle$ отрицательна и временной множитель уменьшается с течением времени по экспоненциальному закону. При этом формула (7.80) для усилителя совпадает при $\exp(\hbar\omega/kT_s) > 1$ с формулой (7.43) для аттенюатора. Если же температура отрицательна, то количество квантов шума увеличивается экспоненциально с течением времени. В этом случае формулы описывают начало процесса возбуждения колебаний в резонаторе. В следующем разделе мы обсудим стационарные решения процесса генерации колебаний внутри резонатора.

Энергию квантового шума усилителя можно связать с эквивалентной ей шумовой температурой входного сопротивления усилителя. Мощность выходного шума для свободно-шумящего усилителя равна

$$N_{\text{out}} = \frac{\hbar\omega BG}{\exp(\hbar\omega/kT_{\text{in}}) - 1}, \quad (7.82)$$

где T_{in} — температура входного сопротивления, B — ширина полосы, а величина G определяет усиление по мощности. Если мы приравняем (7.82) действительной выходной мощности шума N_{act} , которую с помощью формулы (7.80) можно определить соотношением вида

$$N_{\text{act}} = \hbar\omega B \bar{n}(t) = \frac{\hbar\omega B (G - 1)}{1 - \exp(-\hbar\omega/k|T_s|)}, \quad (7.83)$$

где $\bar{n}(t)$ — среднее число квантов выходной мощности, а T_s — спиновая (отрицательная) температура в мазере, то, разрешив полученное уравнение относительно T_{in} , получим

$$T_{\text{in}} = \frac{\hbar\omega}{k} \left\{ \ln \left[\frac{G}{G-1} \left(2 - \exp \frac{-\hbar\omega}{k|T_s|} \right) \right] \right\}^{-1}. \quad (7.84)$$

Для больших значений усиления, $G \gg 1$, и для идеального усилителя, $|T_s| \rightarrow 0$ (в этом случае все спины находятся в верхнем состоянии), предельное значение T_{in} оказывается равным

$$T_{eff} = \frac{\hbar\omega}{k \ln 2}. \quad (7.85)$$

В области микроволновых частот эта величина составляет доли градуса, но на оптических частотах она оказывается порядка 10^4 °К. Это значит, что на оптических частотах основной вклад в увеличение шумовой температуры прибора дает квантовый шум, который будет существенно больше всех других шумов.

Следует еще раз подчеркнуть, что физической причиной квантового шума является спонтанное излучение, которое возникает одновременно с индуцированным излучением при переходе спинов из верхнего состояния в нижнее. Так как спонтанный переход носит случайный, хаотический характер, то в результате такого перехода к основному сигналу совершенно хаотическим образом добавляется дополнительная энергия, которая и называется квантовым шумом.

7.8. Стационарные решения для лазера

Для того чтобы перейти к более реальной модели лазерного усилителя, нам нужно к механизму усиления добавить некоторый механизм потерь, который всегда присутствует в реальной системе. Кроме того, мы должны обеспечить непрерывный подвод энергии сигнала к резонатору.

Мазер резонаторного типа работает как прибор с отрицательным сопротивлением. Если такой прибор работает в усилительном режиме вблизи порога генерации, то, как известно из общей теории усилителей с отрицательным сопротивлением, в этом случае можно получить очень большое усиление на единицу длины резонатора.

После такого вступления напишем гамильтониан для рассматриваемой нами модели. Он имеет вид

$$H = H_0 + H' + H'', \quad (7.86)$$

где

$$H_0 = \hbar\omega a^+a + \sum_j \hbar\omega_j^L b_j^+ b_j + \frac{1}{2} \sum_j \hbar\omega_j^G \sigma_j^z, \quad (7.87)$$

$$H' = \hbar \sum_j k_j (b_j^+ a + b_j a^+) + \hbar \sum_j K_j (\sigma_j^+ a + \sigma_j^- a^+),$$

$$H'' = \hbar k [e(t) a^+ + e^*(t) a].$$

Выбранная нами расчетная модель должна быть ясна из вида гамильтониана и из основного содержания предыдущих глав. Действительно, мы имеем одну моду резонатора частоты ω , связанную с большим числом осцилляторов потерь (частоты ω_j^L) и с большим числом частиц со спином $1/2$ (частоты ω_j^G). Помимо этого мы имеем сигнал $e(t)$ от внешнего генератора, связанный с модой резонатора. Все эти предположения аналогичны тем предположениям, которые были сделаны нами для моделей аттенюатора и мазера. Кроме того, мы пренебрегаем какой бы то ни было прямой связью спиновой системы с осцилляторами потерь.

В этом случае уравнения движения могут быть линеаризованы путем замены оператора σ_z на его ожидаемое значение, а затем могут быть решены точно так же, как мы это уже делали в приложении 3. Тогда мы получим следующее выражение для характеристической функции:

$$C_A(\xi) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha|^2 + i\xi [ik\alpha^* g^*(t) - ik\alpha g(t)] \right\} FLS, \quad (7.88)$$

где

$$g(t) = \int_0^t e(t') u(t-t') dt',$$

$$F = \text{Sp} [\rho_r(0) \exp(i\xi\alpha^* u^* a^+) \exp(i\xi\alpha u a)], \quad (7.89)$$

$$L = \text{Sp} \left[\rho_L(0) \exp \left(i\xi\alpha^* \sum_j v_j^* b_j^+ \right) \exp \left(i\xi\alpha \sum_j v_j b_j \right) \right],$$

$$S = \text{Sp} \left[\rho_s(0) \exp \left(i\xi\alpha^* \sum_j r_j^* \sigma_j^+ \right) \exp \left(i\xi\alpha \sum_j r_j \sigma_j^- \right) \right]$$

и

$$u(t) \approx \exp(-i\omega - 1/2\eta)t,$$

$$v_j(t) = - \frac{ik_j \exp(-i\omega_j^L t) \{1 - \exp[-i(\omega - \omega_j^L) - 1/2\eta]t\}}{i(\omega - \omega_j^L) + 1/2\eta}, \quad (7.90)$$

$$r_j(t) = - \frac{iK_j \exp(-i\omega_j^G t) \{1 - \exp[-i(\omega - \omega_j^G) - 1/2\eta]t\}}{i(\omega - \omega_j^G) + 1/2\eta},$$

$$\eta = \gamma_L - \gamma_G \langle \sigma_z \rangle.$$

Здесь величины γ_L и γ_G определяются точно так же, как и в модели аттенуатора и в модели мазера. В зависимости от спиновой температуры величина η может быть положительной, отрицательной или равной нулю. В этих расчетах мы пренебрегали малыми сдвигами частоты типа (7.70b), обусловленными связью.

Если предположить, что осцилляторы потерь и спины находятся в тепловом равновесии при температуре соответственно T_L и T_s , что внешний сигнал имеет вид

$$e(t) = e_0 e^{-i\omega_0 t} \quad (7.91)$$

и первоначальное состояние поля в резонаторе является состоянием вакуума, то можно показать, что средние значения электрического и магнитного полей в стационарном состоянии пропорциональны величинам

$$\langle p \rangle = k \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \left[- \frac{\eta \cos \omega_0 t + 2(\omega - \omega_0) \sin \omega_0 t}{(\eta/2)^2 + (\omega - \omega_0)^2} \right], \quad (7.92)$$

$$\langle q \rangle = k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left[- \frac{2(\omega - \omega_0) \cos \omega_0 t - \eta \sin \omega_0 t}{(\eta/2)^2 + (\omega - \omega_0)^2} \right].$$

Эти формулы находятся в полном согласии с аналогичными результатами для классического усилителя, так что они дают еще один пример применения теоремы Эренфеста.

Для того чтобы затухли неустановившиеся процессы и было достигнуто стационарное состояние для усиления, предполагается, что потери больше, чем усиление.

Среднее число квантов внутри резонатора в момент времени t равно

$$\langle n(t) \rangle = \frac{1}{2\hbar\omega} \left[\langle p \rangle^2 + \omega^2 \langle q \rangle^2 + 2\hbar\omega \left(\frac{\gamma_L}{\tau_L - 1} + \frac{\gamma_G}{\tau_G + 1} \right) \frac{1 - e^{-\eta t}}{\eta} \right], \quad (7.93)$$

где

$$\tau_L = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT_L}\right), \quad \tau_G = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k|T_s|}\right). \quad (7.94)$$

Первые два члена в выражении (7.93) зависят от внешнего сигнала, в то время как последние слагаемые дают в итоге спонтанное излучение и ответственны за квантовый шум в усилителе.

Мы оставляем все эти вычисления в качестве самостоятельного упражнения для читателя. Подробные детали вычислений можно посмотреть, например, в работе [65].

7.9. Параметрический усилитель и модель для преобразователя частоты

Основная идея параметрического усилителя весьма проста [11]. Пусть имеется обычная радиотехническая LC -цепь, в которой возбуждены колебания. Теперь, если раздвигать пластины конденсатора каждый раз тогда, когда на них появляются заряды (т. е. два раза в течение периода колебаний в LC -цепи), то над зарядами совершается извне работа, и в результате этого в LC -цепь втекает дополнительная энергия. Если пластины сдвигаются обратно в тот момент, когда на них нет зарядов (это также происходит два раза за период колебаний в цепи), то при этом не совершается никакой работы. Таким способом в LC -цепь все время накачивается некоторая дополнительная энергия с удвоенной резонансной частотой (т. е. с частотой в два раза большей, чем частота основных колебаний), и колебания в цепи начинают возрастать.

Если имеются две слабо связанные резонансные LC -цепи с частотами соответственно ω_1 и ω_2 , то дополнительная энергия может подаваться в них подобным же образом

на частоте $\omega = \omega_1 + \omega_2$. Такая система способна усиливать сигнал, поданный на ее вход.

Для квантовомеханического изучения такой системы рассмотрим две моды резонатора с частотами соответственно ω_1 и ω_2 . Гамильтониан такой системы имеет вид

$$H_0 = \hbar\omega_1 a_1^\dagger a_1 + \hbar\omega_2 a_2^\dagger a_2, \quad (7.95)$$

где операторы a_i и a_i^\dagger удовлетворяют следующим условиям коммутации:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0. \quad (7.96)$$

Кроме членов (7.95) в гамильтониане необходимо предусмотреть член, описывающий взаимодействие внешнего источника энергии с модами резонатора ω_1 и ω_2 . Этот член взаимодействия будет обеспечивать подкачку энергии на частоте

$$\omega = \omega_1 + \omega_2 \quad (7.97)$$

в указанные выше моды резонатора. Предположим, что этот член имеет вид

$$H_1 = -\hbar k [a_1^\dagger a_2^\dagger e^{-i(\omega t + \varphi)} + a_1 a_2 e^{i(\omega t + \varphi)}], \quad (7.98)$$

где k — постоянная связи. Отметим, что выражение для гамильтониана взаимодействия типа (7.98) можно получить в приведенном выше классическом примере LC -цепи с помощью изменения емкости или индуктивности. Обоснованием для такого вида гамильтониана взаимодействия является тот факт, что оператор H_1 , во-первых, эрмитов, а во-вторых, приводит к таким уравнениям движения Гейзенберга, которые согласуются с классическими уравнениями движения параметрического усилителя. Это соответствие является следствием теоремы Эренфеста. В работе [52] была сделана попытка вывести формулу (7.98) для гамильтониана взаимодействия H_1 из основных принципов квантовой теории, но эта попытка привела к некоторому несоответствию с уравнениями Максвелла. Точно такое же несоответствие имеет место и в классической теории. Однако ошибка, возникающая из-за такого несоответствия, оказывается незначительной, и принятая модель хорошо согласуется с экспериментом.

Запись гамильтониана взаимодействия в форме (7.98) можно понять также, исходя из закона сохранения энергии. На рис. 10 показаны энергетические уровни гармонических осцилляторов с частотами ω_1 , ω_2 и $\omega = \omega_1 + \omega_2$. Для сохранения энергии в такой системе необходимо, чтобы каждый раз, когда уничтожаются кванты с частотами ω_1 и ω_2 , накачка от внешнего источника создавала квант частоты ω (на рисунке этот процесс обозначен через (а)). Этот процесс на языке операторов рождения и уничтожения можно записать в виде $a_1 a_2 a^+$. Здесь операторы a_1 и a_2 являются операторами уничтожения квантов частоты ω_1 и ω_2 соответственно, а оператор a^+ создает квант частоты ω . Наоборот, если создаются кванты частоты ω_1 и ω_2 , то должен быть уничтожен квант накачки частоты $\omega = \omega_1 + \omega_2$ (на рисунке — процесс (б)). Этот процесс на языке операторов рождения и уничтожения можно записать в виде $a_1^+ a_2^+ a$.

Теперь мы напомним, что когда моды не связаны друг с другом, то операторы $a_j(t)$ и $a(t)$ имеют вид

$$a_j(t) = a_j \exp(-i\omega_j t), \quad a(t) = a \exp(-i\omega t) \quad (j=1,2).$$

Если накачка осуществляется на высокие уровни возбуждения (большое квантовое число), то в этом случае в силу принципа соответствия квантовой механики система ведет себя классическим образом. Тогда оператор $a(t)$, соответствующий накачке, можно заменить на коммутирующую (классическую) переменную $a(t)$ вида $a(t) = a \exp[-i(\omega t + \varphi)]$. В результате этого получаем, что два процесса (а) и (б) на рис. 10 соответствуют двум слагаемым в формуле (7.98).

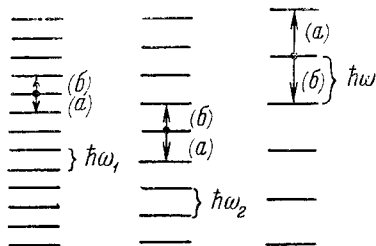


Рис. 10. Энергетические уровни гармонических осцилляторов с частотами ω_1 , ω_2 и $\omega = \omega_1 + \omega_2$. Процесс (а) записывается как a_1, a_2, a^+ и соответствует уничтожению квантов ω_1 и ω_2 и рождению кванта с частотой $\omega = \omega_1 + \omega_2$. Процесс (б) записывается как $a_1^+ a_2^+ a$ и соответствует рождению квантов ω_1 и ω_2 и уничтожению кванта ω .

Заметим, что во всех классических теориях параметрического усилителя всегда предполагается, что возбуждение от накачки значительно больше величины сигнала. А это значит, что и при квантовомеханическом описании системы накачки ее можно рассматривать классически.

Кроме гамильтониана взаимодействия вида (7.98) можно в принципе использовать другой — трехфотонный эрмитов гамильтониан взаимодействия вида

$$H_2 = \hbar k [a_1 a_2^+ e^{i(\omega t + \varphi)} + a_1^+ a_2 e^{-i(\omega t + \varphi)}]. \quad (7.99)$$

В согласии с приведенным выше энергетическим рассмотрением этот гамильтониан соответствует уничтожению двух квантов частоты ω_2 и ω и рождению нового кванта частоты ω_1 (или наоборот). Однако при этом сразу видно, что будет нарушаться закон сохранения энергии, ибо $\hbar\omega_2 + \hbar\omega \neq \hbar\omega_1$, если частота $\omega = \omega_1 + \omega_2$. Кроме того, если мы включим в реальную картину взаимодействия гамильтониан H_2 , то окажется, что при $\omega = \omega_1 + \omega_2$ величина H_2 будет быстро осциллировать со временем и в среднем будет давать нуль, тогда как величина H_1 будет оставаться постоянной. Это видно из того, что при малой константе связи k ($k \ll \omega_1, \omega_2$) величина $a_1(t)$ будет изменяться со временем приблизительно пропорционально $\exp(-i\omega_1 t)$, а величина $a_2^+(t)$ — пропорционально $\exp(i\omega_2 t)$. Очевидно, что все эти соображения являются серьезным аргументом против включения в процесс параметрического усиления гамильтониана взаимодействия вида (7.99).

С другой стороны, если принять

$$\omega = \omega_1 - \omega_2, \quad (7.100)$$

то гамильтониан взаимодействия типа H_2 будет удовлетворять закону сохранения энергии, а гамильтониан H_1 не будет удовлетворять ему. Как мы увидим ниже, последний случай выбора вида частоты ω будет соответствовать случаю параметрического преобразования частоты.

После этого обсуждения возьмем для параметрического усилителя гамильтониан полной системы в виде

$$H_a = H_0 + H_1 \quad (7.101)$$

и примем $\omega = \omega_1 + \omega_2$ (H_0 и H_1 определяются соотношениями (7.95) и (7.98)). В силу соотношений коммутации

(7.96) уравнения движения Гейзенберга для операторов параметрического усилителя принимают вид

$$i \frac{da_1}{dt} = \omega_1 a_1 - k e^{-i(\omega t + \varphi)} a_2^+, \quad (7.102)$$

$$i \frac{da_2^+}{dt} = -\omega_2 a_2^+ + k e^{i(\omega t + \varphi)} a_1.$$

Мы видим, что гамильтониан взаимодействия H_1 связывает операторы a_1 и a_2^+ . Поскольку уравнения (7.102) имеют тот же вид, что и уравнения для классического параметрического усилителя [11], то, следовательно, в силу теоремы Эренфеста гамильтониан взаимодействия H_1 имеет правильный вид в пределах тех приближений, которые принимаются в классической теории параметрического усилителя.

Для преобразователя частоты полный гамильтониан будет иметь соответственно вид

$$H_c = H_0 + H_2 \quad (7.103)$$

и $\omega = \omega_1 - \omega_2$ (H_0 и H_2 определяются выражениями (7.95) и (7.99)). Уравнения движения Гейзенберга принимают в этом случае вид

$$i \frac{da_1}{dt} = \omega_1 a_1 + k e^{-i(\omega t + \varphi)} a_2, \quad (7.104)$$

$$i \frac{da_2}{dt} = \omega_2 a_2 + k e^{i(\omega t + \varphi)} a_1,$$

и мы видим, что гамильтониан взаимодействия H_2 связывает операторы a_1 и a_2 . Так как уравнения (7.104) совпадают по внешнему виду с классическими уравнениями для параметрического преобразователя частоты, то это означает, что вид гамильтониана взаимодействия H_2 выбран правильно.

Нетрудно получить и решения систем уравнений (7.102) и (7.104). Они имеют вид:

а) для параметрического усилителя

$$\begin{aligned} a_1(t) &= e^{-i\omega_1 t} (a_1 \operatorname{ch} kt + i e^{-i\varphi} a_2^+ \operatorname{sh} kt), \\ a_2(t) &= e^{-i\omega_2 t} (a_2 \operatorname{ch} kt + i e^{-i\varphi} a_1^+ \operatorname{sh} kt); \end{aligned} \quad (7.105)$$

б) для параметрического преобразователя частоты

$$\begin{aligned} a_1(t) &= e^{-i\omega_1 t} (a_1 \cos kt - ie^{-i\varphi} a_2 \sin kt), \\ a_2(t) &= e^{-i\omega_2 t} (a_2 \cos kt - ie^{i\varphi} a_1 \sin kt). \end{aligned} \quad (7.106)$$

Как обычно, операторы $a_i(t)$ соответствуют операторам в представлении Гейзенберга, а операторы a_i , не зависящие от времени, — операторам в представлении Шредингера.

Полученные нами решения будут необходимы при изучении статистических свойств различных приборов.

Из полученных решений видно, что в случае параметрического усилителя решения экспоненциально нарастают с течением времени, а для преобразователя частоты энергия непрерывно переходит от одной моды с частотой ω_1 к другой моде с частотой ω_2 .

7.10. Статистические свойства параметрического усилителя

Различные моды резонатора с частотами ω_1 и ω_2 физически эквивалентны друг другу. Поэтому мы будем изучать характеристическую функцию электрических и магнитных полей только для одной моды усилителя с частотой ω_1 . На практике обычно на такую моду с частотой ω_1 ссылаются как на сигнальную моду; тогда моду частоты ω_2 при этом называют холостой модой.

Мы предполагаем, что накачка включается только в момент времени $t = 0$, так что состояние поля в обеих модах описывается простым произведением операторов плотности

$$\rho(0) = \rho_1(0) \rho_2(0), \quad (7.107)$$

где оператор плотности $\rho_1(0)$ описывает систему из осцилляторов на частоте ω_1 , а оператор плотности $\rho_2(0)$ — систему осцилляторов на частоте ω_2 . Если мы, как обычно, положим, что

$$A_1 = \alpha_1 a_1(t) + \alpha_1^* a_1^\dagger(t), \quad (7.108)$$

то характеристическая функция для системы частиц, которая описывает свойства поля на частоте ω_1 , принимает вид

$$C_{A_1}(\xi) = \text{Sp} [\rho_1(0) \rho_2(0) e^{i\xi A_1(t)}]. \quad (7.109)$$

С помощью соотношений (7.105) величину $A_1(t)$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} A_1(t) &= \alpha_1 e^{-i\omega_1 t} (\operatorname{ch} kt) a_1 + \alpha_1^* e^{i\omega_1 t} (\operatorname{ch} kt) a_1^+ + \\ &+ i\alpha_1 e^{-i(\omega_1 t + \varphi)} (\operatorname{sh} kt) a_2^+ - i\alpha_1^* e^{i(\omega_1 t + \varphi)} (\operatorname{sh} kt) a_2 \equiv \\ &\equiv u(t) a_1 + u^*(t) a_1^+ + v(t) a_2 + v^*(t) a_2^+. \end{aligned} \quad (7.110)$$

Функции $u(t)$ и $v(t)$ определяются из этих равенств. Из соотношений коммутации следует, что характеристическую функцию можно представить в виде произведения двух сомножителей:

$$C_{A_1}(\xi) = \operatorname{Sp} [\rho_1(0) e^{i\xi(u a_1 + u^* a_1^+)}] \operatorname{Sp} [\rho_2(0) e^{i\xi(v a_2 + v^* a_2^+)}]. \quad (7.111)$$

Как и в случае аттенюатора и мазера, мы сумели записать характеристическую функцию в виде произведения двух сомножителей, каждый из которых включает в себя операторы только одного осциллятора. Форма этих сомножителей совпадает с той формой, которая встречалась нам раньше много раз. Поэтому вычисление сомножителей в формуле (7.111) для случая, когда на частоте ω_1 в момент времени $t = 0$ имеется сигнал плюс гауссов шум, а на частоте ω_2 — шум, мы оставляем читателю в качестве самостоятельного упражнения. В этом случае, как мы знаем из шестой главы, шум описывается операторами плотности

$$\begin{aligned} \rho_1(0) &= (1 - e^{-\lambda_1}) e^{-\lambda_1 (a_1^+ - w)(a_1 - w^*)}, \\ \rho_2(0) &= (1 - e^{-\lambda_2}) e^{-\lambda_2 a_2^+ a_2}. \end{aligned}$$

Если в начальный момент моды находятся в состоянии вакуума, то оператор плотности имеет вид

$$\rho(0) = |0\rangle_1 |0\rangle_2 {}_1\langle 0| {}_2\langle 0|.$$

Тогда характеристическая функция с помощью выражения (7.110) приводится к виду

$$\begin{aligned} C_{A_1}(\xi) &= \exp \left[-\frac{1}{2} \xi^2 (|u(t)|^2 + |v(t)|^2) \right] = \\ &= \exp \left[-\frac{1}{2} \xi^2 |\alpha_1|^2 (\operatorname{ch}^2 kt + \operatorname{sh}^2 kt) \right]. \end{aligned} \quad (7.112)$$

Отсюда среднее число квантов в моде резонатора частоты ω_1 в момент времени t равно

$$\langle a_1^+ a_1 \rangle = \text{sh}^2 kt. \quad (7.113)$$

Это есть среднее число квантов в момент времени t в том случае, когда в начальный момент времени $t = 0$ число квантов равно нулю. Выходная мощность, обусловленная этими спонтанно испущенными квантами, и носит название квантового шума. В качестве упражнения мы предлагаем читателю показать, что эффективная шумовая температура в этом случае равна

$$T_{eff} = \frac{\hbar \omega_1}{k \ln 2}. \quad (7.114)$$

Она оказывается точно такой же, как и для идеального мазера. Отметим, что в данном случае при получении выражения для этой шумовой температуры нам не было необходимости предполагать очень большое усиление.

7.11. Характеристическая функция для преобразователя частоты

Если для преобразователя частоты использовать решение (7.106), то для оператора $A_1(t)$ получим

$$A_1(t) = u(t)a_1 + u^*(t)a_1^+ + v(t)a_2 + v^*(t)a_2^+, \quad (7.115)$$

где

$$u(t) = \alpha_1 e^{-i\omega_1 t} \cos kt, \quad v(t) = i\alpha_1^* e^{i(\omega_1 t + \varphi)} \sin kt. \quad (7.116)$$

Характеристическая функция для величины A_1 имеет вид

$$C_{A_1} = \text{Sp} [\rho_1(0) e^{i\xi(u a_1 + u^* a_1^+)}] \text{Sp} [\rho_2(0) e^{i\xi(v a_2 + v^* a_2^+)}]. \quad (7.117)$$

По внешнему виду (7.117) совпадает с характеристической функцией усилителя. Однако между ними имеется существенное физическое различие. Для выявления этого различия рассмотрим случай чистого состояния системы, при котором обе моды находятся в состоянии вакуума. Тогда характеристическая функция примет вид

$$C_{A_1}(\xi) = \exp \left[-\frac{\xi^2}{2} |\alpha_1|^2 (|u|^2 + |v|^2) \right] = \exp \left(-\frac{\xi^2}{2} |x_1|^2 \right).$$

Оказывается, что среднее число квантов в момент времени t в моде частоты ω_1 равно нулю, т. е. когда на входе преобразователя частот отсутствует какой-либо входной сигнал, то и на выходе преобразователя частот нет никакого сигнала. Иными словами, преобразователь частот не обладает никаким квантовым шумом и поэтому его шумовая температура равна нулю.

ЗАДАЧИ

7.1. Если генератор напряжений начинает взаимодействовать с резонансной полостью, содержащей осцилляторы потерь, то в этом случае к гамильтониану (7.10) добавляется некоторый член взаимодействия вида

$$H'' = \hbar [f(t) a^\dagger + f^*(t) a].$$

Показать, как этот дополнительный гамильтониан H'' видоизменяет уравнения движения (7.11). Решить эти уравнения для величин $a(t)$. (Воспользоваться методом анализа, приведенным в приложении 3.)

7.2. Пусть функция $f(t)$ в задаче 7.1 имеет вид

$$f(t) = f_0 e^{-i\omega_0 t}.$$

Найти характеристическую функцию для величин p и q в том случае, когда осцилляторы потерь описываются матрицей плотности (7.4), а начальное состояние поля является состоянием вакуума. Найти стационарные значения величин $\langle p \rangle$ и $\langle q \rangle$.

7.3. Показать, что приближенные решения, приведенные в формулах (7.18) и (7.19), удовлетворяют соотношениям коммутации (7.17). Сделать приближения, согласующиеся с приближениями, сделанными в приложении 3.

7.4. Решить мазерные уравнения движения (7.65) с помощью метода, приведенного в приложении 3.

7.5. Показать, что решения (7.69) удовлетворяют уравнению (7.68).

7.6. Проверить формулу (7.76).

7.7. Вычислить характеристическую функцию для модели двухуровневого мазера, если в начальный момент времени в резонаторе имеется гауссов шум и синусоидальный сигнал со случайной фазой. Найти среднее число квантов поля в момент времени t после появления взаимодействия.

7.8. Вычислить среднее число квантов на частоте ω_1 параметрического усилителя в момент времени t , если в начальный момент времени $t = 0$ (см. формулу (7.111))

$$\rho_i(0) = \exp(-\bar{n}_i) e^{w_i a_i^*} |0\rangle \langle 0| e^{w_i a_i} \quad (i = 1, 2)$$

и

$$w_i = \sqrt{\bar{n}_i} e^{-i\varphi_i} \quad (i = 1, 2).$$

7.9. Решить задачу 7.8 в том случае, когда

$$\rho_i(0) = |n_i\rangle \langle n_i| \quad (i = 1, 2).$$

7.10. Для параметрического преобразователя частоты вычислить среднее число квантов в моде частоты ω_1 в момент времени t , если в момент времени $t = 0$

$$\rho_i(0) = |n_i\rangle \langle n_i|.$$

7.11. Для параметрического усилителя вычислить кет-вектор состояния в момент времени t , если в момент времени $t = 0$ было состояние $|n_1, n_2\rangle$. (Замечание: вычислять в представлении взаимодействия.)

Определить вероятность того, что в момент времени t усилитель находится в состоянии $|m_1, m_2\rangle$, если в момент времени $t = 0$ он находился в состоянии $|n_1, n_2\rangle$.

7.12. Показать, что для параметрического усилителя оператор плотности в момент времени t может быть записан в виде

$$\rho(t) = \exp\left(-\frac{iH_0 t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iH_I t}{\hbar}\right) \rho(0) \exp\left(\frac{iH_I t}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iH_0 t}{\hbar}\right),$$

где

$$H_0 = \hbar\omega_1 a_1^\dagger a_1 + \hbar\omega_2 a_2^\dagger a_2, \quad H_I = -\hbar k (a_1^\dagger a_2^\dagger e^{-i\varphi} + a_1 a_2 e^{i\varphi}),$$

а $\rho(0)$ есть оператор плотности в начальный момент времени $t = 0$.

ГАМИЛЬТониан поля излучения в представлении плоских волн

Выведем гамильтониан (4.91) энергии поля излучения в кубической полости в представлении плоских волн. Подставим \mathbf{E} и \mathbf{H} (формулу (4.90)) в (4.91) и после несложных алгебраических преобразований получим

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar}{4\tau} \sum_{l, \sigma} \sum_{l', \sigma'} \sqrt{\omega_l \omega_{l'}} \{(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{l'\sigma'}) + ([\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] [\mathbf{e}_{l'\sigma'}, \mathbf{k}_{l'}])\} \times \\
 & \times \int_{\text{по полости}} d\tau [a_{l\sigma}(t) \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) - a_{l\sigma}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})] \times \\
 & \times [a_{l'\sigma'}(t) \exp(i\mathbf{k}_{l'} \mathbf{r}) - a_{l'\sigma'}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}_{l'} \mathbf{r})]. \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

Так как

$$\mathbf{k}_{\pm l} = \pm \frac{2\pi}{L} (l_1 \mathbf{i} + l_2 \mathbf{j} + l_3 \mathbf{k}) \quad (\text{A.2})$$

(это следует из (4.82)), мы видим, что

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\tau} \int_{\text{по полости}} d\tau \exp[\pm i(\mathbf{k}_l + \mathbf{k}_{l'}) \mathbf{r}] &= \delta_{l', -l}, \\
 \frac{1}{\tau} \int_{\text{по полости}} d\tau \exp[\pm i(\mathbf{k}_l - \mathbf{k}_{l'}) \mathbf{r}] &= \delta_{l', l}. \quad (\text{A.3})
 \end{aligned}$$

Если мы подставим эти формулы в (A.1), проведем суммирование по l' и учтем, что $\omega_l \equiv \omega_{-l}$, то получим

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{l, \sigma, \sigma'} \frac{\hbar \omega_l}{4} \{ & (a_{l\sigma} a_{l\sigma}^+ + a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}) [(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{l\sigma'}) + ([\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] [\mathbf{e}_{l\sigma'} \mathbf{k}_l])] - \\
 & - (a_{l\sigma} a_{-l\sigma'} + a_{l\sigma}^+ a_{-l\sigma'}^+) [(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}) + ([\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] [\mathbf{e}_{-l\sigma'} \mathbf{k}_{-l}])]\}. \quad (\text{A.4})
 \end{aligned}$$

С помощью обычных правил векторного анализа проводим следующие преобразования:

$$([\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] [\mathbf{e}_{l\sigma'} \mathbf{k}_l]) = ([\mathbf{e}_{l\sigma} [\mathbf{k}_l \mathbf{e}_{l\sigma'}]] \mathbf{k}_l) = [(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{l\sigma'}) \mathbf{k}_l - (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l) \mathbf{e}_{l\sigma'}] \mathbf{k}_l = (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{l\sigma'}) = \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (\text{A.5})$$

где использовано, что $(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l) = 0$ и $\mathbf{k}_l \mathbf{k}_l = 1$. С помощью аналогичных преобразований получаем

$$([\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l] [\mathbf{e}_{-l\sigma'} \mathbf{k}_{-l}]) = (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}) (\mathbf{k}_l \mathbf{k}_{-l}) = -(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}), \quad (\text{A.6})$$

где использовано, что $\mathbf{k}_{-l} = -\mathbf{k}_l$. Из (A.6) следует, что последний член в (A.4) тождественно обращается в нуль, в то время как из (A.5) следует, что первый член сводится к $2\delta_{\sigma\sigma'}$, и, таким образом,

$$H = \sum_{l, \sigma} \frac{\hbar\omega_l}{2} (a_{l\sigma} a_{l\sigma}^+ + a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}),$$

что согласуется с (4.91).

Приложение Б

ИМПУЛЬС ПОЛЯ В ПОЛОСТИ

В этом приложении мы рассчитаем классический импульс, связанный с полем излучения в полости. Если мы подставим \mathbf{E} и \mathbf{H} из (4.90) в (4.93), то получим

$$\begin{aligned} \mathbf{G} = & -\frac{\hbar}{2c} \sum_{l, \sigma} \sum_{l', \sigma'} \sqrt{\omega_l \omega_{l'}} [\mathbf{e}_{l\sigma} [\mathbf{e}_{l'\sigma'} \mathbf{k}_{l'}]] \times \\ & \times \frac{1}{\tau} \int_{\text{по полости}} d\tau [a_{l\sigma}(t) \exp(i\mathbf{k}_l \mathbf{r}) - a_{l\sigma}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r})] \times \\ & \times [a_{l'\sigma'}(t) \exp(i\mathbf{k}_{l'} \mathbf{r}) - a_{l'\sigma'}^+(t) \exp(-i\mathbf{k}_{l'} \mathbf{r})]. \quad (\text{B.1}) \end{aligned}$$

Этот интеграл совпадает с интегралом, рассчитанным в приложении А. Если мы используем этот результат, то увидим, что \mathbf{G} преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{G} = \sum_{l, \sigma, \sigma'} \frac{\hbar\omega_l}{2c} \{ & (a_{l\sigma} a_{l\sigma'}^+ + a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma'}) [\mathbf{e}_{l\sigma} [\mathbf{e}_{l\sigma'} \mathbf{k}_l]] - \\ & - (a_{l\sigma} a_{-l\sigma'} + a_{l\sigma}^+ a_{-l\sigma'}^+) [\mathbf{e}_{l\sigma} [\mathbf{e}_{-l\sigma'} \mathbf{k}_{-l}]] \}. \quad (\text{B.2}) \end{aligned}$$

Для простоты мы опустили явную зависимость от времени.

Используя хорошо известное векторное тождество, получаем

$$\begin{aligned} [\mathbf{e}_{l\sigma} [\mathbf{e}_{l\sigma'} \mathbf{k}_l]] &= (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{l\sigma'}) \mathbf{k}_l = \delta_{\sigma\sigma'} \mathbf{k}_l, \\ [\mathbf{e}_{l\sigma} [e_{-l\sigma'} \mathbf{k}_{-l}]] &= -(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}) \mathbf{k}_l, \end{aligned} \quad (\text{Б.3})$$

так как

$$(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{k}_l) = 0 \quad \text{и} \quad \mathbf{k}_{-l} = -\mathbf{k}_l.$$

Таким образом, (Б.2) сводится к следующему выражению:

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{2} \sum_{l,\sigma} \hbar \mathbf{k}_l (a_{l\sigma} a_{l\sigma}^+ + a_{l\sigma}^+ a_{l\sigma}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l,\sigma,\sigma'} \hbar \mathbf{k}_l (a_{l\sigma} a_{-l\sigma'} + a_{l\sigma}^+ a_{-l\sigma'}^+) (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}), \end{aligned} \quad (\text{Б.4})$$

так как $\mathbf{k}_l = \omega_l \mathbf{k}_l / c$. Теперь покажем, что последняя сумма по l, σ, σ' тождественно равна нулю. Так как $\mathbf{k}_l = -\mathbf{k}_{-l}$, а σ' и σ — индексы суммирования, мы можем записать первую сумму по l, σ и σ' следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum \hbar \mathbf{k}_l a_{l\sigma} a_{-l\sigma'} (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}) &= \\ &= \frac{1}{4} \sum \hbar \mathbf{k}_l a_{l\sigma} a_{-l\sigma'} \{(\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'}) - (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{e}_{-l\sigma'})\} \equiv 0. \end{aligned}$$

Таким же способом можно показать, что член с $a^+ a^+$ обращается в нуль. Поэтому из (Б.4) получается формула (4.94), приведенная в тексте.

Приложение В

СВОЙСТВА ПОПЕРЕЧНОЙ δ -ФУНКЦИИ*

Поперечная δ -функция определяется следующим образом:

$$\delta_{ij}^T(\rho) = \frac{1}{L^3} \sum_l [\delta_{ij} - (\mathbf{k}_l)_i (\mathbf{k}_l)_j] \exp(i\mathbf{k}_l \rho) \quad (\text{В.1})$$

или

$$\delta_{ij}^T(\rho) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \exp(i\mathbf{k}\rho), \quad (\text{В.2})$$

где $\mathbf{k} = k\mathbf{k}$, $k^2 = |\mathbf{k}|^2$, $d\mathbf{k} \equiv dk_x dk_y dk_z$.

*) Эти свойства поперечной δ -функции изложены в курсе, прочитанном доктором Д. Валека в Стэнфордском университете.

Теперь мы выведем некоторые полезные свойства $\delta_{ij}^T(\rho)$.

$$1. \quad \delta_{ij}^T(\rho) = \delta_{ji}^T(\rho). \quad (B.3)$$

Эти свойства сразу следуют из определения (B.2), так как $\delta_{ij} = \delta_{ji}$ и $k_i k_j = k_j k_i$.

$$2. \quad \delta_{ij}^T(\rho) = \delta_{ij}^T(-\rho). \quad (B.4)$$

Если в (B.2) мы заменим $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, то $d\mathbf{k} \rightarrow -d\mathbf{k}$ и из (B.2) получаем

$$\begin{aligned} \delta_{ij}^T(\rho) &= - \int \int \int_{+\infty}^{-\infty} d\mathbf{k} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \exp(-i\mathbf{k}\rho) = \\ &= + \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \exp(-i\mathbf{k}\rho) \equiv \delta_{ij}^T(-\rho). \end{aligned}$$

$$3. \quad \sum_j \frac{\partial \delta_{ij}^T}{\partial x_j} = 0. \quad (B.5)$$

Из (B.2) после дифференцирования по x_j и суммирования по j получаем

$$\sum_j \frac{\partial \delta_{ij}^T(\rho)}{\partial x_j} = \frac{i}{(2\pi)^3} \sum_j \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} k_j d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}\rho) \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right).$$

Но

$$\sum_j k_j \left(\delta_{ij} - \frac{k_j k_i}{k^2} \right) = k_i - \frac{k_i \sum_j k_j k_j}{k^2} \equiv 0,$$

так как $\sum_j k_j k_j = k^2$.

$$4. \quad \sum_i \frac{\partial \delta_{ij}^T(\rho)}{\partial x_i} = 0. \quad (B.5)$$

Это сразу следует из (B.3) и (B.5).

$$5. \quad \delta_{ij}^T(\rho) = \delta_{ij} \delta(\rho) + \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\rho|}, \quad (B.7)$$

где

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \equiv \delta(x) \delta(y) \delta(z) \quad (B.8)$$

— обычная трехмерная δ -функция Дирака, так как

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_x e^{ik_x x}. \quad (\text{B.9})$$

Чтобы доказать (B.7), используем (B.2) и (B.8):

$$\delta_{ij}^T(\rho) = \delta_{ij} \delta(\rho) - \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{k_i k_j}{k^2} \exp(i\mathbf{k} \rho). \quad (\text{B.10})$$

Но

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk \exp(i\mathbf{k} \rho)}{k^2} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k_i k_j \exp(i\mathbf{k} \rho)}{k^2} dk. \quad (\text{B.11})$$

Поэтому (B.10) можно записать следующим образом:

$$\delta_{ij}^T(\rho) = \delta_{ij} \delta(\rho) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk \exp(i\mathbf{k} \rho)}{k^2}. \quad (\text{B.12})$$

Последний интеграл можно рассчитать косвенным методом, воспользовавшись представлениями электростатики. Потенциал заряда e равен

$$V = \frac{e}{4\pi r}. \quad (\text{B.13})$$

Этот потенциал удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\nabla^2 V = -e\delta(r). \quad (\text{B.14})$$

Отсюда находим, что

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(r) = -\frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp(i\mathbf{k} r), \quad (\text{B.15})$$

где использовано (B.8). Отсюда легко получить, что

$$\frac{1}{4\pi r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{dk \exp(i\mathbf{k} r)}{k^2}. \quad (\text{B.16})$$

Если мы подействуем оператором ∇^2 на левую и правую части равенства (B.16), то получим формулу (B.15). Затем подставляем (B.16) в (B.12), и формула (B.7) доказана.

$$6. \quad \frac{\partial \delta_{ij}^T(\rho)}{\partial x_k} = - \frac{\partial \delta_{ij}^T(\rho)}{\partial x'_k}, \quad (\text{B.17})$$

если $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Эту формулу легко получить, дифференцируя (B.2) по x_k и x'_k .

СООТНОШЕНИЯ КОММУТАЦИИ ДЛЯ D И B

В этом приложении мы выведем соотношения коммутации (4.135) и (4.136) из основного текста.

Так как $B = \text{rot} A$, то в представлении Шредингера получаем

$$\begin{aligned} [D_1(\mathbf{r}), B_1(\mathbf{r}')] &= \left[D_1(\mathbf{r}), \frac{\partial A_3(\mathbf{r}')}{\partial y'} - \frac{\partial A_2(\mathbf{r}')}{\partial z'} \right] \equiv \\ &\equiv \frac{\partial}{\partial y'} [D_1(\mathbf{r}), A_3(\mathbf{r}')] - \frac{\partial}{\partial z'} [D_1(\mathbf{r}), A_2(\mathbf{r}')]. \end{aligned} \quad (\text{Г.1})$$

Из (4.123) и свойств симметрии (В.3) и (В.4) следует, что

$$[D_1(\mathbf{r}), B_1(\mathbf{r}')] = i\hbar \frac{\partial}{\partial y'} \delta_{13}^T(\rho) - i\hbar \frac{\partial}{\partial z'} \delta_{12}^T(\rho), \quad (\text{Г.2})$$

где $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Из (В.2) приложения В

$$\frac{\partial \delta_{13}^T}{\partial y'} = + \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \frac{k_1 k_3 k_2}{k^2} \exp(i\mathbf{k}\rho), \quad (\text{Г.3})$$

$$\frac{\partial \delta_{12}^T}{\partial x'} = + \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{k} \frac{k_1 k_2 k_3}{k^3} \exp(i\mathbf{k}\rho).$$

Если мы подставим эти уравнения в (Г.2), то увидим, что $[D_1(\mathbf{r}), B_1(\mathbf{r}')] = 0$ в представлении Шредингера, откуда следует формула (4.135) основного текста в представлении Гейзенберга (аналогичное доказательство справедливо для $[D_2, B_2]$ и $[D_3, B_3]$).

Далее рассмотрим коммутатор двух перпендикулярных компонент, например D_1 и B_2 . Получаем

$$\begin{aligned} [D_1(\mathbf{r}), B_2(\mathbf{r}')] &= \left[D_1(\mathbf{r}), \left(\frac{\partial A_1(\mathbf{r}')}{\partial z'} - \frac{\partial A_3(\mathbf{r}')}{\partial x'} \right) \right] = \\ &= \frac{\partial}{\partial z'} [D_1(\mathbf{r}), A_1(\mathbf{r}')] - \frac{\partial}{\partial x'} [D_1(\mathbf{r}), A_3(\mathbf{r}')] = \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial z'} \delta_{11}^T(\rho) - i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta_{13}^T(\rho), \end{aligned} \quad (\text{Г.4})$$

где мы использовали соотношения коммутации (4.123).

Из формул (В.2) и (В.8) приложения В получаем

$$\frac{\partial}{\partial z'} \delta_{11}^T(\rho) = \frac{\partial}{\partial z'} \delta(\rho) + \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k_1^2 k_3}{k^2} \exp(i\mathbf{k}\rho) d\mathbf{k}, \quad (\text{Г.5})$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} \delta_{13}^T(\rho) = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k_1 k_3 k_1}{k^2} \exp(i\mathbf{k}\rho) d\mathbf{k}.$$

Подстановка этих выражений в (Г.4) дает

$$[D_1(\mathbf{r}), B_3(\mathbf{r}')] = +i\hbar \frac{\partial}{\partial z'} \delta(\rho) \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \delta(\rho), \quad (\Gamma.6)$$

так как $\rho = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Аналогично доказываются формулы для $[D_2, B_3]$ и $[D_3, B_1]$, и, таким образом, формула (4.136a) доказана. Совершенно так же доказывается формула (4.136b).

Приложение Д

ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ D И B

Выведем гейзенберговские уравнения движения (уравнения (4.138)). Гамильтониан задан формулой (4.137). Поскольку, как это видно из (4.131a), все компоненты D коммутируют, мы с помощью формулы (4.137) выводим для x -компоненты D следующее выражение:

$$i\hbar \frac{dD_1(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{1}{2\mu_0} \int d\tau' [D_1(\mathbf{r}, t), \mathbf{B}^2(\mathbf{r}', t)], \quad (\text{Д.1})$$

где $\mathbf{B}^2 = B_1^2 + B_2^2 + B_3^2$. Из (4.135) следует, что $[D_1, B_1^2] = 0$, так что (Д.1) сводится к следующему выражению:

$$i\hbar \frac{dD_1(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{1}{2\mu_0} \int d\tau' \{ [D_1(\mathbf{r}, t), B_2^2(\mathbf{r}', t)] + [D_1(\mathbf{r}, t), B_3^2(\mathbf{r}', t)] \}. \quad (\text{Д.2})$$

В задаче 1.8, f) было показано, что

$$[D_1, B_2'^2] = [D_1, B_2'] B_2' + B_2' [D_1, B_2'], \quad (\text{Д.3})$$

где использовано обозначение $\mathbf{B}' \equiv \mathbf{B}(\mathbf{r}', t)$. С помощью (4.136) уравнение (Д.3) преобразуется следующим образом:

$$[D_1, B_2'^2] = -2i\hbar B_2' \frac{\partial}{\partial z} \delta(\rho), \quad (\text{Д.4})$$

так как $(\partial/\partial z) \delta(\rho)$ есть c -число и коммутирует с B_2' .

Аналогично

$$[D_1, B_3'^2] = +2i\hbar B_3' \frac{\partial}{\partial y} \delta(\rho). \quad (\text{Д.5})$$

Если мы подставим (Д.4) и (Д.5) в (Д.2), получим

$$i\hbar \frac{dD_1}{dt} = \frac{i\hbar}{\mu_0} \left[\frac{\partial}{\partial y} \int d\tau' B_3(\mathbf{r}', t) \delta(\rho) - \frac{\partial}{\partial z} \int d\tau' B_2(\mathbf{r}', t) \delta(\rho) \right]. \quad (\text{Д.6})$$

Но из определения δ -функции следует, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau' f(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = f(\mathbf{r}), \quad (\text{Д.7})$$

так что (Д.6) сводится к следующему выражению:

$$i\hbar \frac{dD_1(\mathbf{r}, t)}{dt} = \frac{i\hbar}{\mu_0} \left[\frac{\partial B_3(\mathbf{r}, t)}{\partial y} - \frac{\partial B_2(\mathbf{r}, t)}{\partial z} \right]. \quad (\text{Д.8})$$

Но $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$ и выражение в скобках представляет собой x -компоненту $\text{rot } \mathbf{B}$.

Аналогично выводятся уравнения для y - и z -компонент \mathbf{D} , и, таким образом, уравнения (4.138a) выведены. Вывод уравнений (4.138b) предоставляется читателю.

Приложение E

ВЫЧИСЛЕНИЕ СООТНОШЕНИЙ КОММУТАЦИИ ДЛЯ ПОЛЯ

Покажем, что

$$\left[A_k(\mathbf{r}, t), \int \frac{\epsilon_0}{2} (\dot{A}(\mathbf{r}', t))^2 d\tau' \right] = i\hbar \dot{A}_k^T(\mathbf{r}, t). \quad (\text{E.1})$$

Так как \mathbf{r}' — переменная интегрирования, мы можем записать левую часть (E.1) в виде

$$\sum_l \int \frac{\epsilon_0}{2} d\tau' [A_k(\mathbf{r}), \dot{A}_l(\mathbf{r}') \dot{A}_l(\mathbf{r}')] = i\hbar \sum_l \int d\tau' \dot{A}_l(\mathbf{r}') \delta_{kl}^T(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (\text{E.2})$$

где использовано тождество

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (\text{E.3})$$

и соотношения коммутации (4.180).

Прежде всего необходимо установить еще одно свойство поперечной δ -функции. Рассмотрим разложение произвольного вектора

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_l \sum_{\sigma=1}^3 B_{l\sigma} \mathbf{e}_{l\sigma} \exp(-i\mathbf{k}_l \mathbf{r}), \quad (\text{E.4})$$

где $\mathbf{e}_{l\sigma}$ ($\sigma = 1, 2, 3$) — три взаимно перпендикулярных единичных вектора и $B_{l\sigma}$ — коэффициенты разложения. Можно записать \mathbf{B} как сумму компонент, одна из которых параллельна \mathbf{k}_l (продольная) и две перпендикулярны \mathbf{k}_l (поперечные). Таким образом,

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}^T + \mathbf{B}^L. \quad (\text{E.5})$$

Если мы положим $e_{l\alpha} = \frac{k_l}{|k_l|}$, то из формулы (E.4) получим

$$B^T(r) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_l \sum_{\sigma=1}^2 B_{l\sigma} e_{l\sigma} \exp(-ik_l r), \tag{E.6}$$

$$B^L(r) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_l B_{l3} e_{l3} \exp(-ik_l r),$$

где $\text{div } B^T = 0$ и $\text{rot } B^L = 0$.

Рассмотрим теперь интеграл

$$I = \sum_{i=1}^3 \int d\mathbf{r} B_i(\mathbf{r}) \delta_{ij}^T(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \tag{E.7}$$

Покажем, что

$$I = B_j^T(\mathbf{r}'), \tag{E.8}$$

т. е. δ_{ij}^T поперечная δ -функция выделяет поперечную компоненту вектора.

Если мы подставим (E.4) и (B.1) в (E.7), то получим

$$I = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{i=1}^3 \sum_l \sum_{\sigma=1}^2 B_{l\sigma} \int d\mathbf{r} \exp(-ik_l r) (e_{l\sigma})_i \times \\ \times \exp(-ik_{l'} r') \sum_{l'} \frac{1}{L^3} \exp[ik_{l'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] (\delta_{ij} - k_{l'i} k_{l'j}). \tag{E.9}$$

Если мы заметим, что

$$\frac{1}{L^3} \int_0^L d\mathbf{r} \exp[i(\mathbf{k}_{l'} - \mathbf{k}_l) \mathbf{r}] = \delta_{ll'}, \tag{E.10}$$

и вспомним, что

$$k_l = \frac{2\pi}{L} (l_1 i + l_2 j + l_3 k), \tag{E.11}$$

а также просуммируем в (E.9) по l' , то выражение (E.9) преобразуется следующим образом:

$$I = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_l \sum_{\sigma=1}^2 B_{l\sigma} \exp(-ik_l r') \sum_{i=1}^3 (e_{l\sigma})_i (\delta_{ij} - k_{li} k_{lj}). \tag{E.12}$$

Легко показать, что

$$\sum_{i=1}^3 (\mathbf{e}_{l\sigma})_i (\delta_{ij} - k_{li} k_{lj}) = \begin{cases} (\mathbf{e}_{l\sigma})_j, & \text{если } \sigma = 1, 2, \\ 0, & \text{если } \sigma = 3. \end{cases} \quad (\text{E.13})$$

Используя это, получаем из (E.12)

$$I = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_l \sum_{\sigma=1}^2 B_{l\sigma} \exp(-ik_l r') (\mathbf{e}_{l\sigma})_j.$$

Теперь, используя выражение (E.6), легко показать, что соотношение (E.8) справедливо. Если мы вспомним, что $\delta_{ij}^T = \delta_{ji}^T$, то увидим, что (E.1) получается из (E.2) с помощью формул (E.7) и (E.8).

Приложение Ж

ВЫЧИСЛЕНИЕ СУММ В УРАВНЕНИИ (5.137)

В этом приложении мы рассчитаем сумму в уравнении (5.137) основного текста [24].

Рассмотрим сумму по поляризациям σ . На рис. 11 показано расположение волнового вектора и дипольного момента атома (обозначены вектора \mathbf{k}_l , \mathbf{x} , \mathbf{x}' и углы θ_l и φ_l). Для простоты мы

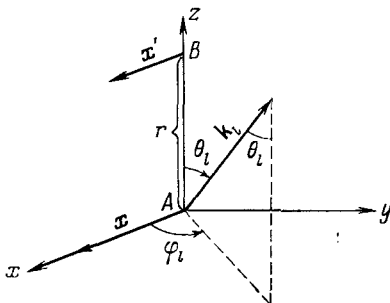


Рис. 11. Расположение волнового вектора и атомного дипольного момента.

предположим, что \mathbf{x} и \mathbf{x}' имеют только x -компоненты. Волновой вектор имеет компоненты

$$\mathbf{k}_l = (\sin \theta_l \cos \varphi_l, \sin \theta_l \sin \varphi_l, \cos \theta_l). \quad (\text{Ж.1})$$

Единичные ортогональные векторы поляризации могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{l_1} &= (-\cos \theta_l \cos \varphi_l, -\cos \theta_l \sin \varphi_l, \sin \theta_l), \\ \mathbf{e}_{l_2} &= (\sin \varphi_l, -\cos \varphi_l, 0). \end{aligned} \quad (\text{Ж.2})$$

Атомные дипольные моменты имеют следующие компоненты:

$$\mathbf{x} = |\mathbf{x}| [1, 0, 0], \quad \mathbf{x}' = |\mathbf{x}'| [1, 0, 0]. \quad (\text{Ж.3})$$

При таком выборе векторов поляризации сумма по σ в (5.137) равна

$$\sum_{\sigma=1}^2 (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}) (\mathbf{e}_{l\sigma} \mathbf{x}') = |\mathbf{x}| |\mathbf{x}'| (\cos^2 \theta_l \cos^2 \varphi_l + \sin^2 \varphi_l). \quad (\text{Ж.4})$$

Используя соотношения (4.110) и (4.116), можно заменить сумму по l в (5.137) интегралом

$$\sum_l \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi c)^3} \int_0^\infty \omega_l^2 d\omega_l \int_0^\pi \sin \theta_l d\theta_l \int_0^{2\pi} d\varphi_l, \quad (\text{Ж.5})$$

так что (5.137) приобретает вид

$$c(1; 2; 0; t) = -\frac{e^2 |\mathbf{x}| |\mathbf{x}'| \omega \omega'}{2\hbar \varepsilon_0 (2\pi c)^3 i} \int_0^\infty \frac{\omega_l d\omega_l [1 - e^{-i(\omega_l - \omega')t}]}{[i(\omega - \omega_l) + \gamma_A/2] (\omega_l - \omega')} \times \\ \times \int_0^\pi \sin \theta_l d\theta_l \int_0^\pi d\varphi_l (\sin^2 \varphi_l + \cos^2 \theta_l \cos^2 \varphi_l) e^{ik_l r \cos \theta_l}. \quad (\text{Ж.6})$$

Интегралы по φ_l и θ_l легко вычисляются:

$$\int_0^{2\pi} \sin^2 \varphi_l d\varphi_l = \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi_l d\varphi_l = \pi. \quad (\text{Ж.7})$$

Если мы положим $y = \cos \theta_l$, то получим

$$\pi \int_{-1}^{+1} dy (1 + y^2) e^{ik_l r y} = 4\pi \left[\frac{\sin k_l r}{k_l r} + \frac{\cos k_l r}{(k_l r)^2} - \frac{\sin k_l r}{(k_l r)^3} \right]. \quad (\text{Ж.8})$$

Пусть $k_l r \gg 1$. Тогда в (Ж.8) необходимо сохранить только первый член, так что формула (Ж.6) сводится к следующей:

$$c(1; 2; 0; t) = -\frac{1}{r} \frac{e^2 |\mathbf{x}| |\mathbf{x}'| \omega \omega'}{4\pi^2 \varepsilon_0 \hbar c^2 i} \int_0^\infty \frac{\sin(\omega_l r/c) [1 - e^{-i(\omega_l - \omega')t}]}{[i(\omega - \omega_l) + \gamma_A/2] (\omega_l - \omega')} d\omega_l, \quad (\text{Ж.9})$$

так как $\omega_l = ck_l$.

Предположим, что $1/\gamma_A$ — половина времени жизни атома A — очень коротко, так что излучение можно рассматривать как переход в непрерывном спектре. Так как подынтегральное выражение в (Ж.9) имеет острый максимум при $\omega_l \approx \omega'$, можно вынести множитель $[i(\omega - \omega_l) + \gamma_A/2]^{-1}$ из-под знака интеграла и заменить ω_l на ω' . По той же причине можно, не внося большой погрешности, заменить нижний предел интегрирования по ω_l на $-\infty$. В этом случае (Ж.9) сводится к следующему выражению:

$$c(1; 2; 0; t) \approx -\frac{1}{r} \frac{e^2 |x| |x'| \omega \omega' \mu_0}{4\pi^2 \hbar i [i(\omega - \omega') + \gamma_A/2]} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega_l \sin\left(\frac{\omega_l r}{c}\right) [1 - e^{-i(\omega_l - \omega')t}]}{\omega_l - \omega'}. \quad (\text{Ж.10})$$

Чтобы рассчитать интеграл, мы положим

$$2\pi\xi = \omega_l - \omega'. \quad (\text{Ж.11})$$

Тогда интеграл можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi} \sin \frac{r}{c} (2\pi\xi + \omega') (1 - e^{-i2\pi t \xi}) = \\ &= \sin\left(\frac{\omega' r}{c}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi} \cos \frac{2\pi r \xi}{c} (1 - \cos 2\pi t \xi) - \\ &\quad - i \cos \frac{\omega' r}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi} \sin \frac{2\pi r \xi}{c} \sin 2\pi t \xi + \\ &\quad + \cos \frac{\omega' r}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi} \sin \frac{2\pi r \xi}{c} (1 - \cos 2\pi t \xi) - \\ &\quad - i \sin \frac{\omega' r}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{\xi} \sin 2\pi t \xi \cos \frac{2\pi r \xi}{c}. \quad (\text{Ж.12}) \end{aligned}$$

Первые два интеграла равны нулю, так как подынтегральные выражения являются нечетными функциями ξ . Последние два интеграла сводятся к следующим:

$$1) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin rx}{x} dx = \pi. \quad (\text{Ж.13})$$

Этот интеграл можно вычислить с помощью преобразования Лапласа.

$$2) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin px \cos qx}{x} dx = \begin{cases} \pi & (p > q), \\ 0 & (p < q). \end{cases} \quad (\text{Ж.14})$$

тот интеграл вычисляется с помощью тождества

$$\sin px \cos qx = \frac{1}{2} [\sin(p+q)x + \sin(p-q)x]$$

и интеграла (Ж.13).

Если использовать (Ж.13) и (Ж.14), то (Ж.11) приобретает вид

$$I = \begin{cases} 0 & \text{при } t < r/c, \\ +\pi e^{-\omega' r/c} & \text{при } t > r/c. \end{cases} \quad (\text{Ж.15})$$

Поэтому (Ж.10) равно

$$c(1; 2; 0; t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t < r/c, \\ -\frac{1}{r} \frac{e^2 |x| |x'| \omega \omega' \mu_0 e^{+i\omega' r/c}}{4\pi \hbar i [i(\omega - \omega') + \gamma_A/2]} & \text{при } t > r/c. \end{cases} \quad (\text{Ж.16})$$

Это как раз тот результат, который мы хотели получить.

Приложение 3

ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ АТТЕНЮАТОРА

Мы получим приближенное решение уравнений движения аттенюатора (7.11) с помощью метода Вигнера — Вайскопфа, который изложен в гл. V. Введем преобразования Лапласа:

$$\bar{a}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} a(t) dt \equiv L\{a(t)\},$$

$$\bar{b}_j(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} b_j(t) dt \equiv L\{b_j(t)\}. \quad (3.1)$$

Отсюда следует, что

$$L\left\{\frac{da}{dt}\right\} = s\bar{a}(s) - a, \quad L\left\{\frac{db_j}{dt}\right\} = s\bar{b}_j(s) - b_j, \quad (3.2)$$

где a и b_j — операторы в шредингеровской картине при $t = 0$.

С помощью этих соотношений получаем преобразование Лапласа формул (7.11):

$$(s + i\omega) \bar{a}(s) = a - i \sum_j k_j \bar{b}_j(s), \quad (3.3)$$

$$(s + i\omega_j) \bar{b}_j(s) = b_j - ik_j^* \bar{a}(s). \quad (3.4)$$

Если мы решим уравнение (3.4) для $\bar{b}_j(s)$ и подставим это решение в уравнение (3.3), то после несложных алгебраических преобразований получим формулу

$$\bar{a}(s) = \frac{a - i \sum_j \frac{k_j b_j}{s + i\omega_j}}{s + i\omega + \sum_k \frac{|k_k|^2}{s + i\omega_k}}, \quad (3.5)$$

которую мы можем записать формально следующим образом:

$$\bar{a}(s) = \bar{u}(s) a + \sum_j \bar{v}_j(s) b_j. \quad (3.6)$$

Обратное преобразование формулы (3.5) имеет вид

$$a(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} ds e^{st} \frac{a - i \sum_j \frac{k_j b_j}{s + i\omega_j}}{s + i\omega + \sum_k \frac{|k_k|^2}{s + i\omega_k}}, \quad (3.7)$$

где $\varepsilon =$ малое положительное число. Произведем замену переменной:

$$s = \varepsilon + iy. \quad (3.8)$$

Тогда формула (3.7) приобретает вид

$$a(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy e^{iyt} e^{\varepsilon t} \left(a - \sum_j \frac{k_j b_j}{y + \omega_j - i\varepsilon} \right)}{y + \omega - i\varepsilon - \sum_k \frac{|k_k|^2}{y + \omega_k - i\varepsilon}}. \quad (3.9)$$

Снова заменим суммирование интегрированием в знаменателе и получим

$$-\sum_k \frac{|k_k|^2}{y + \omega_k - i\varepsilon} \rightarrow -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|k_k|^2 \rho(\omega_k) d\omega_k}{\omega_k + y - i\varepsilon} \equiv I. \quad (3.10)$$

Если $\varepsilon \rightarrow 0$, а y заменено на $-\omega$, то

$$I \approx \Delta\omega - i \frac{\gamma}{2}, \quad (3.11)$$

где

$$\Delta\omega = -\mathcal{P} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|k_k|^2 \rho(\omega_k) d\omega_k}{\omega_k - \omega} \right\}, \quad (3.12)$$

$$\gamma/2 = \pi |k_k|^2 \rho(\omega_k) |_{\omega_k=\omega}. \quad (3.13)$$

Когда $\varepsilon \rightarrow 0$, приближенное выражение для (3.9) имеет вид

$$\begin{aligned} a(t) &\approx \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{iyt} \frac{a - \sum_j \frac{k_j b_j}{y + \omega_j}}{y + \omega + \Delta\omega - i\gamma/2} = \\ &= a \exp\left(-i(\omega + \Delta\omega)t - \frac{\gamma t}{2}\right) - \sum_j \frac{b_j k_j e^{-i\omega_j t}}{\omega - \omega_j + \Delta\omega - i\gamma/2} \times \\ &\times \left\{ 1 - \exp\left[i(\omega_j - \omega - \Delta\omega)t - \frac{\gamma t}{2}\right] \right\} \equiv u(t)a + \sum_j v_j(t) b_j. \quad (3.14) \end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. П. А. М. Дирак, Принципы квантовой механики, Физматгиз, 1960.
2. A. M e s s i a h, Quantum Mechanics, Interscience Publishers, Inc., New York, 1961.
3. E. M e r z b a c h e r, Quantum Mechanics, John Wiley a. Sons, Inc., New York, 1961.
4. Л. Ш и ф ф, Квантовая механика, ИЛ, 1957.
5. Д. Б о м, Квантовая теория, Физматгиз, 1961.
6. R. H. D i c k e, I. P. W i t t k e, Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Mass., 1960.
7. L. P a u l i n g, E. B. W i l s o n, Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill Book Company, New York, 1935.
8. М. С т о у н, Линейные преобразования в гильбертовом пространстве.
9. И о г а н н ф о н Н е й м а н. Математические основы квантовой механики, «Наука», 1964.
10. С. Ш в е б е р, Введение в релятивистскую квантовую теорию поля, ИЛ, 1963.
11. У. Л ю н с е л л, Связанные и параметрические колебания в электронике, ИЛ, 1963.
12. W. H. L o u i s e l l, J. Appl. Phys. **33**, 2435 (1962).
13. Г. Г о л д с т е й н, Классическая механика, Гостехиздат, 1957.
14. R. K u b o, J. Phys. Soc. (Japan) **7**, 1100 (1962).
15. F. C o e s t e r, H. K u m m e l, Nucl. Phys. **17**, 477 (1960).
16. G. W e i s s, A. M a r a d u d i n, J. Math. Phys. **3**, 771 (1962).
17. W. M a g n u s, Commun. Pure Appl. Math. **7**, 649 (1954).
18. E. W i c h m a n, J. Math. Phys. **2**, 876 (1961).
19. D. F i n k e l s t e i n, Commun. Pure Appl. Math. **8**, 245 (1955).
20. R. P. F e y n m a n, Phys. Rev. **84**, 108 (1951).
21. G. C. W i c k, Phys. Rev. **80**, 268 (1950).
22. F. D y s o n, Phys. Rev. **75**, 486, 1736 (1949).
23. P. A. M. D i r a c, Proc. Roy. Soc. (London), Ser. A, **114**, 243 (1927).

24. E. Fermi, *Rev. Mod. Phys.* 4, 87 (1932).
25. В. Гайтлер, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956.
26. J. M. Jauch, K. M. Watson, *Phys. Rev.* 74, 950, 1485 (1948); 75, 1249 (1949).
27. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, Квантовая электродинамика, изд-во «Наука», 1969.
28. V. F. Weisskopf, E. Wigner, *Z. Physik* 63, 54 (1930).
29. R. V. Churchill, *Modern Operational Mathematics in Engineering*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1944.
30. E. T. Jaynes, F. W. Cummings, *Proc. IRE* 51, 89 (1963).
31. J. von Neumann, *Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttinger Math. Phys. Nachrichten*, 245—272 (1927).
32. P. A. M. Dirac, *Proc. Cambr. Phil. Soc.* 25, 62 (1929); 26, 376 (1930); 27, 240 (1930).
33. R. S. Tolman, *The Principles of Statistical Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, 1938.
34. V. Fano, *Rev. Mod. Phys.* 29, 74 (1957).
35. D. ter Haar, *Report. Progr. Phys.* 24, 304 (1961).
36. C. E. Shannon, W. Weaver, *The Mathematical Theory of Communication*, The University of Illinois Press, Urbana, Illinois, 1949.
37. E. T. Jaynes, *Phys. Rev.* 106, 620 (1957).
38. E. T. Jaynes, *Phys. Rev.* 108, 171 (1957).
39. H. A. Tolhoek, S. R. de Groot, *Physica* 15, 833 (1951).
40. W. R. Bennet, *Proc. IRE* 44, 609 (1956).
41. I. R. Gordon, in «*Proceedings of Third International Conference on Quantum Electronics*» (ed. N. Bloembergen), Columbia University Press, New York, and Dunod Cie., Paris, 1963.
42. A. E. Siegman, *Microwave Solid-state Masers*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1964.
43. H. B. Callen, T. A. Welton, *Phys. Rev.* 83, 34 (1951).
44. J. Weber, *Phys. Rev.* 90, 977 (1953).
45. M. W. Muller, *Phys. Rev.* 106, 8 (1957).
46. R. V. Pound, *Ann. Phys. (N.Y.)* 1, 24 (1957).
47. M. W. P. Strandberg, *Phys. Rev.* 106, 617 (1957).
48. K. Shimoda, H. Takahasi, C. H. Townes, *J. Phys. Soc. Japan* 12, 686 (1957).
49. R. Serber, C. H. Townes, in «*Quantum Electronics Symposium*» (ed. C. H. Townes), Columbia University Press, New York, 1960, p. 233.
50. A. E. Siegman, *Proc. IRE* 49, 633 (1961).
51. I. R. Senitzky, *Phys. Rev.* 115, 227 (1959); 111, 3 (1958).
52. W. H. Louisell, A. Yariv, A. E. Siegman, *Phys. Rev.* 124, 1646 (1961).
53. E. Kanai, *Progr. Theor. Phys. (Kyoto)* 3, 440 (1948).
54. W. E. Brittin, *Phys. Rev.* 77, 396 (1950).
55. V. M. Myers, *Am. J. Phys.* 27, 507 (1959).
56. E. H. Kerner, *Can. J. Phys.* 36, 371 (1958).

57. W. K. H. S t e v e n s, Proc. Phys. Soc. (London) **72**, 1027 (1958).
58. I. R. S e n i t z k y, Phys. Rev. **119**, 670, 1807 (1960).
59. F. L. V e r n o n, Jr., The Theory of a General Quantum System Interacting with a Linear Dissipative System, Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California, 1959 (unpublished).
60. I. R. S e n i t z k y, Phys. Rev. **123**, 1 525 (1961).
61. J. S c h w i n g e r, J. Math. Phys. **2**, 407 (1961).
62. W. H. W e l l s, Ann. Phys. (N. Y.) **12**, 1 (1961).
63. H. E k s t e i n, X. R o s t o k e r, Phys. Rev. **100**, 1023 (1955).
64. J. P. G o r d o n, L. R. W a l k e r, W. H. L o u i s e l l, Phys. Rev. **129**, 481 (1963); **130**, 807 (1963).
65. W. H. L o u i s e l l, Quantum Statistics of Maser with Bandwidth, «International Conference on Quantum Electronics» (ed. N. Bloembergen), Columbia University Press, New York, and Dunod Cie., Paris, 1963.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Алгебра некоммутативных операторов 65
Амплитуда вероятности 78, 79
Ансамбли статистические 220, 232
Антикоммутатор 125, 132
Аттенюатор 335
—, уравнение движения 344
—, характеристическая функция 347
Бекера — Хаусдорфа теорема 149
Блоха теорема 325
Бора магнетон 91, 136
Бозоны 123
—, операторная алгебра 98—134
Бра-вектор 26
—, длина 28
—, матричное представление 53
де-Бройля длина волны 88
Взаимодействия представление 100, 102
Вектор-потенциал 206
— —, разложение по нормальным колебаниям 206, 210
— —, — — плоским волнам 210
Вектор состояния 23
Вероятность перехода 247
— — в единицу времени 248
Вигнера — Вайскопфа приближение 258
Волновая функция 19
— —, интерпретация вероятностная 76
— —, — геометрическая 19
— —, представление импульсное 18
Волновая функция, представление координатное 17
— — состояния с минимальной неопределенностью 87
Волновой пакет 88
Вырождение 105
Гамильтона уравнение 99
— — для осциллятора 113
Гамильтониан 112
— атома в поле излучения 238
— осциллятора 115
Гармонический осциллятор 75
— — в переменном электрическом поле 170
Гауссов шум 326
Гауссово распределение 325
Гейзенберга представление 94
— — для осциллятора 112
— — операторов спина 138
— уравнение движения 94
— — — для A 235
— — — — D и B 225
— — — — линии связи 203
Гильбертово пространство 29, 126
Дельта-функция Дирака 29, 43
— поперечная 234
Динамические переменные 43, 64
Динамическое поведение системы 89
Дипольный момент атома 250
— — —, матричный элемент 250, 251
Дирака δ -функция 29, 43
Дираковская формулировка волновой механики 15, 17
Длина кет- и бра-векторов 28
Допплера эффект 264

- Закон сохранения импульса 265
 Законы сохранения 246, 265
 — — при излучении фотона 265
 — — — квантовых переходах 246
 Золотое правило Ферми 248
- Излучение индуцированное 254
 — спонтанное 254
 Измерение напряженностей поля излучения 228
 — энергии стационарного состояния 257
 Импульс поля излучения 156, 214, 215
 Интеграл движения 104
- Кет-вектор 19, 21
 —, длина 28
 —, матричное представление 53
 Квантование поля излучения 215, 233
 — линии связи 200—204
 Квантовые шумы 336
 — — лазера 272
 Коммутационные соотношения 65
 — — для D и A 220
 — — — D и B 224
 Консервативная система 89
 Кронекера символ 40
 Кулоновская калибровка 230
- Линейное векторное пространство 21
 Лоренцевская форма линии 271, 276
 Лэмбовский сдвиг 257
- Мазер 335, 355
 —, уравнения движения 357
 —, — —, стационарные решения 364
 —, характеристическая функция 361
 Максвелла — Больцмана распределение 308, 309
 Максвелла уравнение 204
- Максвелла уравнение без источников 204
 — — с источниками 230—232
 Матрица 52
 — обратная 52
 — плотности 294
 — унитарная 52, 62
 — эрмитова 52
 — эрмитовски сопряженная 52
 Матричное представление 52
 Модель резонатора 339
 Момент количества движения 130, 131
 — — —, соотношения коммутации 131, 132
- Наблюдаемые величины 43, 44, 64
 — —, измерение 44, 76
 — —, среднее значение по ансамблю 77
 Норма векторов 28
 Нормальная форма функции операторов 154
 Нормальное произведение 151
 Нулевые колебания 108, 192, 351, 354
- Оператор 29
 — нормального упорядочения 151
 —, матричное представление 53, 126
 — обратный 32
 — рождения 103
 — сдвига 70
 — спиновый Паули 130
 — статистический 294
 — тождественного преобразования 30, 32, 39
 — унитарный 67, 90
 — уничтожения 116, 150
 — числа частиц 118, 124, 157
 — эрмитов 34, 64
 Ортогональность 39
 Осциллятор 112
 —, волновые функции 128
 —, гамилтониан 115
 —, производящая функция 179
 —, энергетические уровни 123
 Осцилляторы связанные 177

- Параметрический преобразователь частоты 367
 — — —, уравнения движения 371
 — — —, характеристическая функция 374
 — усилитель 367
 — —, статистические свойства 372
 — —, уравнения движения 371
 Планка распределение 352
 Поглощение излучения 248
 Поле излучения в полости 204
 — — — —, импульс 156, 214
 — — — —, квантование 215, 233
 — — — —, энергия 205
 Полнота системы собственных функций 42, 50
 Полуширина линии резонатора 347
 Представление взаимодействия 100, 102
 — Гейзенберга 102
 — импульсное 20
 — координатное 18
 — матричное 52
 — числа частиц 124
 — Шредингера 93, 102
 Преобразование подобия 63
 — унитарное 63, 90
 Принцип неопределенности 84
 — суперпозиции 22
 Причинность 15, 16
 Пуассона распределение 198, 238, 317
 — скобки 100

 Свободная частица 104
 Сигнал плюс шум 326
 Скалярное произведение 23
 След (шпур) 52
 — спиновых операторов 133
 Собственная функция 104
 Собственные значения 36
 — — импульса 67
 — — координаты 67
 — колебания плоскости 218
 — — —, спектральная плотность 218
 Собственный вектор 36, 37

 Соответствия принцип 65
 Соотношение неопределенностей 84
 — ортогональности 39
 — ортонормировки 70
 — полноты или замкнутости 42, 70
 Состояние вакуума 354
 — с минимальной неопределенностью 353
 Спиновые операторы Паули 130, 185
 — — —, базисные векторы 133
 — — —, представление Гейзенберга 138
 — — —, — Шредингера 139
 — — —, собственные значения 133
 — — —, соотношения антикоммутации 133
 — — —, — коммутации 133
 Статистический оператор 294
 — — осциллятора в тепловом равновесии 308
 — —, уравнение движения 299—302
 — — частиц со спином 310
 — — чистого состояния 302

 Тепловой шум 350, 354

 Унитарное преобразование 63, 90
 Уравнение движения 17
 — — намагнитченности 315
 — —, представление взаимодействия 100
 — —, — Гейзенберга 94
 — —, — Шредингера 17
 Условия нормировки 40
 — ортонормировки 46

 Фермионы 123
 Фононы 337
 Функция преобразования 58, 128
 — распределения вероятностей 87, 317
 — характеристическая 315
 — — аттенюатора 347
 — — мазера 361

- Функция характеристическая
 осциллятора в тепловом рав-
 новесии 323—325
 — — преобразователя частоты
 374
- Чистое состояние 293, 302
- Шварца неравенство 83
 Ширина линии 256
 — — доплеровская 269
 — — естественная 262
 — —, связанная со столкнове-
 ниями 282
 Шпур (см. след) 52
 Шредингера уравнение 17
 — —, зависящее от времени 89
 — —, не зависящее от времени
 75
 — —, решение методом нормаль-
 ного упорядочения 119
 Шум тепловой 350, 354
- Шумовая температура мазера
 361
 — — параметрического уси-
 лителя 374
 — — преобразователя частоты
 374
- Экспоненциальное распределе-
 ние 323
 Электрона спин 130, 136
 — — в магнитном поле 137
 Электронный спиновый резонанс 277
 — — —, теория квантовая
 283
 — — —, — полуклассическая
 277
 Энергия поля излучения 205
 Энтропия 303
 — сигналов и шумов 330—333
 Эрмита теорема 310, 315
 Эрмитово сопряжение 27, 34

ОГЛАВЛЕНИЕ

От переводчиков	7
Предисловие	10

Глава I

ДИРАКОВСКАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1.1. Введение	15
1.2. Кет-векторы	21
1.3. Скалярное произведение. Бра-векторы	23
1.4. Линейные операторы	29
1.5. Эрмитовы операторы	34
1.6. Задача на собственные значения	36
1.7. Наблюдаемые величины. Полнота. Разложение по собственным кет-векторам. δ -функция Дирака	43
1.8. Матрицы	52
1.9. Матричное представление кет- и бра-векторов и опе- раторов	53
1.10. Функции преобразования. Изменение представления	58
1.11. Квантование. Пример непрерывного спектра	64
1.12. Измерение наблюдаемых величин. Вероятностная ин- терпретация	76
1.13. Принцип неопределенности Гейзенберга	80
1.14. Динамическое поведение квантовой системы	89
1.15. Представление Шредингера в квантовой механике	93
1.16. Представление Гейзенберга	94
1.17. Представление взаимодействия	100
1.18. Волновая механика	102
1.19. Свободная частица. Изменение во времени волнового пакета с минимальной неопределенностью	104

Глава II

ПРОСТЫЕ КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ

2.1. Введение	110
1. Гармонический осциллятор	112
2.2. Осциллятор в гейзенберговском представлении	112
2.3. Задача о собственных значениях энергии осциллятора	118

2.4. Физическая интерпретация операторов N , a и a^+ . Бозоны и фермионы	123
2.5. Функция преобразования от N -представления к q -представлению	128
2. Спин электрона	130
2.6. Спиновый оператор Паули	130
2.7. Энергия спина в магнитном поле	136
2.8. Оператор спина в гейзенберговском представлении	138
3. Электроны в электрическом и магнитном полях	140
2.9. Гамильтониан электрона в электромагнитном поле	140

Глава III

ОПЕРАТОРНАЯ АЛГЕБРА

3.1. Введение	143
1. Произвольные операторы	144
3.2. Некоторые теоремы об операторах	144
2. Бозе-операторы рождения и уничтожения	150
3.3. Нормальное произведение, оператор нормального упорядочения и нормальная форма	151
3.4. Алгебраические свойства бозе-операторов	156
3.5. Решение уравнения Шредингера с помощью нормального упорядочения. Гармонический осциллятор с вынуждающей силой	170
3.6. Уравнение Шредингера для двух независимых пар бозе-операторов	177
3.7. Производящая функция для собственных функций осциллятора. Волновой пакет с минимальной неопределенностью	179
3. Спиновые операторы Паули	185
3.8. Алгебраические свойства спиновых операторов при $s = 1/2$	185

Глава IV

КВАНТОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

4.1. Введение	191
4.2. Квантование LC -контура, возбуждаемого генератором	192
4.3. Квантование линии связи, не имеющей потерь	200
4.4. Представление классического поля излучения в полости в виде бесконечного набора осцилляторов	204
Уравнения Максвелла (204). Энергия и импульс поля (205). Разложение векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ по собственным колебаниям полости (206). Разложение поля по плоским волнам (210). Импульс поля (214).	

4.5. Квантование электромагнитного поля в вакууме	215
4.6. Спектральная плотность собственных колебаний	218
4.7. Коммутационные соотношения для полей в вакууме, относящиеся к одному моменту времени	220
Коммутационные соотношения для D и A , относящиеся к одному моменту времени (220). Коммутационные соотношения для операторов D и B , относящиеся к одному моменту времени (224). Гейзенберговские уравнения движения для векторов D и B (225).	
4.8. Нулевые флуктуации поля	226
4.9. Классическое поле излучения при наличии источников	230
4.10. Квантование поля при наличии источников	233

Глава V

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ С ВЕЩЕСТВОМ

5.1. Введение	237
5.2. Гамильтониан атома в поле излучения	238
5.3. Теория возмущений, зависящих от времени	240
5.4. Поглощение излучения атомом	248
5.5. Индуцированное и спонтанное излучение возбужденного атома	254
5.6. Теория естественной ширины линии излучения	256
5.7. Эффект Доплера	264
5.8. Распространение света в вакууме	271
5.9. Полуклассическая теория электронного спинового резонанса	277
5.10. Влияние соударений на уширение линий двухуровневой спиновой системы	282
5.11. Спиновый резонанс в квантованном поле	283

Глава VI

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА

6.1. Введение	292
6.2. Статистический оператор	295
6.3. Некоторые свойства статистического оператора	297
6.4. Уравнение движения для оператора ρ	299
6.5. Чистое состояние	302
6.6. Энтропия	303
6.7. Матрица плотности для частиц со спином $1/2$	310
6.8. Характеристическая функция	315
6.9. Распределение Пуассона	317
6.10. Экспоненциальное распределение	323
6.11. Сигнал плюс шум	326
6.12. Энтропия сигналов и шумов	330

Глава VII

КВАНТОВАЯ СТАТИСТИКА АТТЕНЮАТОРОВ И ЛИНЕЙНЫХ УСИЛИТЕЛЕЙ

7.1. Введение	335
7.2. Модель механизма потерь. Фононы	337
7.3. Уравнения движения аттенюатора	344
7.4. Характеристическая функция аттенюатора. Полуширина линии резонатора	347
7.5. Модель мазера	355
7.6. Мазерные уравнения движения	358
7.7. Мазерная характеристическая функция. Шумовая температура	361
7.8. Стационарные решения для мазера	364
7.9. Параметрический усилитель и модель для преобразователя частоты	367
7.10. Статистические свойства параметрического усилителя	372
7.11. Характеристическая функция для преобразователя частоты	374
<i>Приложение А.</i> Гамильтониан поля излучения в представлении плоских волн	377
<i>Приложение Б.</i> Импульс поля в полости	378
<i>Приложение В.</i> Свойства поперечной δ -функции	379
<i>Приложение Г.</i> Соотношения коммутации для \mathbf{D} и \mathbf{B}	382
<i>Приложение Д.</i> Гейзенберговские уравнения движения для \mathbf{D} и \mathbf{B}	383
<i>Приложение Е.</i> Вычисление соотношений коммутации для поля	384
<i>Приложение Ж.</i> Вычисление сумм в уравнении (5.137)	386
<i>Приложение З.</i> Приближенное решение уравнений движения аттенюатора	389
Литература	392
Предметный указатель	395